Weiterentwicklung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC

GRS - 358

Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH

Weiterentwicklung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC

Abschlussbericht

Claus Spengler
Siegfried Arndt
Sara Beck
Jens Eckel
Dandy Eschricht
Walter Klein-Heßling
Holger Nowack
Nils Reinke,
Martin Sonnenkalb
Gunter Weber

Oktober 2014

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrundeliegende F&E-Vorhaben wurde im Auftrag des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) unter dem Kennzeichen RS1508 durchgeführt.

Die Arbeiten wurden von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH ausgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

GRS - 358
ISBN 978-3-944161-39-6

Deskriptoren:

Containment, Iod- und Aerosolverhalten, Reaktorsicherheit, Rechenprogramm ASTEC, Rechenprogramm COCOSYS, Schmelze-Beton-Wechselwirkung, Sicherheitsbehälter, Thermohydraulik

Kurzfassung

In diesem Vorhaben ist die langjährige, vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) unterstützte Entwicklung der beiden GRS-Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC für Phänomene und Vorgänge im Sicherheitsbehälter von Reaktoranlagen fortgesetzt worden. Entsprechend der übergeordneten Zielsetzung wurden wesentliche Modelle in COCOSYS und ASTEC für die wichtigsten zurzeit untersuchten Themen gemäß internationalem Stand von Forschung und Entwicklung (F&E) aktualisiert und verbessert.

Um das Fluten von Raumbereichen in Reaktoranlagen zu simulieren, wurde in COCOSYS eine entsprechende Modifikation des Zonenmodells erarbeitet und umgesetzt, wobei ein neuer generischer Typ einer Strömungsverbindung zwischen zwei Raumbereichen eingeführt wurde. Durch diese Strömungsverbindung können gleichzeitig Wasser und Gase transportiert werden. Die Arbeiten sollen in einem nachfolgenden Vorhaben fortgeführt und dahingehend ergänzt werden, dass im Fall gefluteter Raumbereiche z. B. auch die tatsächlichen Gegebenheiten für technische Verbindungstypen wie Türen, Klappen etc. genauer berücksichtigt werden können.

In Zusammenarbeit mit dem Fraunhofer Institut ITWM Kaiserslautern ist die Anbindung des dort in Entwicklung befindlichen dreidimensionalen Pool-Modells CoPool an COCOSYS für die detaillierte Berechnung der Konvektion und Temperaturverteilung in einer Wasservorlage realisiert worden.

Ferner ist für COCOSYS ein Modell für Metallfaser-Ventingfilter für detaillierte Untersuchungen zur Wirksamkeit von kontrollierten Druckentlastungen des Containments erstellt und an zwei Experimenten aus der amerikanischen ACE-A-Serie mit entsprechenden Filtertypen erfolgreich erprobt worden. Darüber hinaus ist der Modellstand in COCOSYS für weitere wichtige quelltermrelevante Vorgänge verbessert worden:

- Berücksichtigung des Einflusses der Dampfkonzentration in der Atmosphäre auf die Zersetzung von Ozon, welches zur Iodaerosolbildung beiträgt,
- Modellierung der radiolytischen Bildung von Salpetersäure, welche Einfluss auf den pH-Wert des Sumpfes und daher auf die Iodchemie nimmt, in der Gasphase des Containments,

- Berücksichtigung des Feuchteeinflusses auf die chemische Bindung (Chemisorption) von Iod auf Farbanstrichen,
- Aktualisierung der drei Abwasch-Modelle für unlösliche (AULA) und lösliche Aerosole sowie für Iod (Filmmodell). Diese werden im nachfolgenden Vorhaben im neu strukturierten Hauptmodul AFP zusammengeführt, um eine geschlossene Beschreibung der komplexen Abwasch-Vorgänge mit COCOSYS zu ermöglichen.
- Modellierung der Zersetzung von CsI unter radioaktiver Bestrahlung, bei der flüchtiges I_2 frei gesetzt wird.

Bei der Umstrukturierung des Spaltprodukt- und Aerosol-Moduls AFP zur Aufstellung konsistenter Stoffmengenbilanzen wurden wichtige Meilensteine erreicht, wie z. B. die Umsetzung des in RS1185 erarbeiteten Konzeptes innerhalb von Detail-Modellen zur Modellierung von Volumenkondensation, Aerosol-Ablagerung und Transportvorgängen durch Abwaschen und Drainage. Die noch offenen Restarbeiten zur neuen Modellierung der Iodchemie, zum Nuklidverhalten und zum Pool-Scrubbing werden im Nachfolgevorhaben abgeschlossen.

Gekoppelte Analysen von ATHLET-CD und COCOSYS zur Berechnung des Gesamtverhaltens in Reaktorkreislauf und Containment nehmen einen immer breiteren Raum ein. Ein bislang offener Punkt betraf die Vorgehensweise zur Kopplung beider Codes bei Versagen des RDB und hinsichtlich des Austrags von Schmelze in die Reaktorgrube. Die Vorgehensweise wurde im Vorhaben zwischen den beiden GRS-Entwicklerteams abgestimmt und es wurden erste Schritte zur technischen Umsetzung auf beiden Seiten eingeleitet. Auch dieser Punkt wird im Nachfolgevorhaben abgeschlossen werden.

Die Arbeiten der GRS bei der gemeinsamen ASTEC-Weiterentwicklung mit IRSN konzentrierten sich im Vorhaben RS1508 auf Phänomene im Sicherheitseinschluss sowie auf einzelne Erweiterungen mit Bezug zu Siedewasserreaktoren. Der Fokus lag hierbei auf den ASTEC-Modulen CPA (Containment-Thermohydraulik) und MEDICIS (Schmelze-Beton-Wechselwirkung) bzw. der Kopplung zwischen Kühlkreislauf (CESAR) und Containment-Thermohydraulik (CPA). Das im früheren Vorhaben RS1185 bereitgestellte DCH-Modell in CPA ist hier um die Berechnung chemischer Reaktionen der luftgetragenen Schmelze sowie von Wärmeübergängen zwischen Schmelze und Gas erweitert worden und in Nachrechnungen zu DCH-Versuchen in der DISCO-Anlage bei KIT überprüft worden.

Ferner sind die in COCOSYS verfügbaren Modelle und Korrelationen für Rekombinatoren der Typen „AREVA“ und „AECL“ nach ASTEC/CPA übertragen und dafür ein Nutzerhandbuch erstellt worden.

Für die Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung in der gefluteten Situation wurde das vereinfachte Modell zur Berücksichtigung der Flutung der Schmelze von COCOSYS nach ASTEC/MEDICIS übertragen und erfolgreich getestet.

Im Rahmen der Beteiligung an dem EU-Projekt JASMIN, das eine Erweiterung von ASTEC für die Anwendung auf natriumgekühlte schnelle Reaktoren als Zielsetzung verfolgt, wurden – motiviert durch die Auswertung früherer Arbeiten der GRS (80er bis Anfang der 90er Jahre) zum schnellen Brüter SNR-300 – die im Containment-Rechenprogramm CONTAIN verfügbaren Modelle zum Natriumverhalten im Hinblick auf ihre Eignung für ASTEC für verschiedene Testfälle (u. a. FAUNA-Versuche zu Natriumbränden und ABCOVE-Experimente zum Verhalten von Natriumaerosolen) erprobt und weitergehender Modellentwicklungsbedarf für ASTEC identifiziert.

Mit den ASTEC-Modulen CESAR für den Kühlkreislauf und CPA für den Sicherheitsbehälter wurden Testrechnungen am Beispiel eines SWR der Baulinie 69 durchgeführt. Dabei zeigte sich die prinzipielle Anwendbarkeit beider Module auch in gekoppelter Fahrweise. Weiterhin wurden Modellunterschiede in COCOSYS und CPA untersucht, die für einen SWR-72-Rechenfall Unterschiede bei der Temperaturentwicklung in der Kondensationskammer zwischen COCOSYS und ASTEC/CPA hervorgerufen hatten.

Aus den durchgeführten Untersuchungen zur Rückhaltung von Spaltprodukten in Wasservorlagen (Pool-Scrubbing) und zum diesbezüglichen Modell SPARC wurde geschlossen, dass in SPARC viele Einzelphänomene mit einem hohen Detailgrad analytisch beschrieben werden, für die aber einzeln keine Validierung durchgeführt werden kann. Neue Anstrengungen zur weiteren Modellvalidierung sind erst bei verbesserter experimenteller Datenlage sinnvoll. Der internationale Stand von Wissenschaft und Technik sollte dahingehend weiter beobachtet werden.

Im Rahmen der Teilnahme am EU-Vorhaben SARNET2 (abgeschlossen im März 2013) war die GRS mit ASTEC-relevanten Arbeiten am Arbeitspaket WP4 beteiligt. Die Arbeiten umfassten u. a. die Teilnahme an User-Workshops zu ASTEC, Beiträge zu Konferenzen (ERMSAR 2013) sowie zu Veröffentlichungen in Zeitschriften (Annals of Nuclear Energy, Nuclear Engineering and Design), Beiträge zur Erstellung aktualisier-

ter Dokumente im Rahmen der Freigabe neuer ASTEC-Versionen, Anwendungsrechnungen zu KONVOI, Unterstützung von externen Code-Anwendern bei der Lösung von Problemen, Einführungsveranstaltungen zu ASTEC.

Im Rahmen des während der Vorhabenslaufzeit gestarteten neuen EU-Vorhabens CESAM zur Weiterentwicklung und Anwendung von ASTEC beteiligte sich die GRS intensiv bei der Fortschreibung des internationalen Standes von F&E zu den Themen gefilterte Druckentlastung, Pool-Scrubbing, Wirkung von NIS-Rekombinatoren und MCCI, jeweils mit Blick auf Modellansätze, die für ASTEC geeignet sind. In CESAM ist eine größere Anzahl von ASTEC Anwendern vereinigt, die bereits in SARNET2 zusammengearbeitet haben.

Für die Erhebung des Standes von internationaler F&E wurde mit größeren Beiträgen an der Erstellung der OECD/CSNI State-of-the-Art Berichte zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI, inkl. Betrachtung der möglichen Kühlbarkeit mit Wasser) und zur Wirksamkeit von gefilterten Druckentlastungssystemen des Containments mitgewirkt.

Für die Zufriedenheit von externen Partnern bei der COCOSYS- und ASTEC-Nutzung und nicht zuletzt auch als bedeutsames Mittel der Qualitätssicherung wurden in diesem Vorhaben entsprechende Arbeiten zur Nutzerunterstützung / Auswertung von Rückflüssen aus der Anwendung durchgeführt. Für die Sicherstellung der internationalen Akzeptanz und der Kontinuität oder gar Ausweitung der Nutzung bei externen Partnern ist es zukünftig nötig, den Code COCOSYS in den Punkten Programmcode, Dokumentation und Anwenderfreundlichkeit zu verbessern. Dies soll eine wichtige Zielsetzung in einem Anschlussvorhaben darstellen.

Abstract

In this project the long-term code development of GRS's simulation tools COCOSYS and ASTEC sponsored by the BMWi, for phenomena within the containment of light water reactors (LWR) has been continued. In correspondence to the top-level objective several important models in COCOSYS and ASTEC for phenomena which are currently under investigation have been updated and improved according to the progress of international research and development (R&D).

A modification of the COCOSYS zone model has been elaborated and implemented in COCOSYS; this allows now the simulation of a complete flooding of containment rooms by introducing a new type of generic flow connection between two compartments. Through this flow connection a combined flow of water gas in parallel is possible. This work will be continued in a possible follow-up development project in order to consider in more detail the actual conditions of technical flow connections like doors, flaps etc.

In co-operation with ITWM Kaiserslautern the coupling of COCOSYS with the pool model CoPool, which allows the detailed calculation of 3D convection patterns and temperature distribution in a deep water pool and which is under development at ITWM, has been realized.

Furthermore, a model for metal fibre filter systems has been developed for COCOSYS for detailed investigations on the efficiency of filtered containment venting systems. This model has been successfully tested on the basis of two experiments from the ACE-A-series in which appropriate filter types had been used. Apart from this, the models for several other source term related phenomena have been improved:

- Consideration of the impact of steam concentration on the decomposition of ozone; the latter contributes to the formation of iodine aerosols
- Modelling of the radiolytic formation of nitric acid, which takes effect on the pH of the sump and thus on the iodine chemistry, within the atmosphere of the containment
- Consideration of the impact of humidity on the chemisorption of iodine on paint coatings

– Updates of the washdown-models. Three models are provided in COCOSYS: 1) for non-soluble (AULA) aerosols, 2) for soluble aerosols and 3) for iodine (film model). These models will be merged in the frame of the follow-up development project to gain a closed description of the complex washdown processes within COCOSYS

– Modelling of the decomposition of CsI under radioactive exposure, during which volatile iodine is being released

The restructuring work of the fission product and aerosol behaviour module AFP in COCOSYS for consistent balances of amounts of substances has been conducted up to the achievement of important milestones (implementation of the concept elaborated in project RS1185 in form of detailed models for volume condensation, aerosol deposition, transport by washdown and drainage, etc.). However, some remaining work has to be finished in the frame of the follow-up development project, as regards e. g. the iodine chemistry, nuclide behaviour, and pool scrubbing submodels.

Coupled analyses with ATHLET-CD and COCOSYS for the simulation of the integral behaviour in cooling circuit and containment are of increasing relevance. An open point in the coupled application of the two codes is related to the failure of the RPV and the release of melt into the reactor cavity. The strategy of the coupling between COCOSYS and ATHLET-CD in case of RPV failure has been reconciled amongst the two development teams in GRS, and first actions for a technical implementation have been initiated on both sides. This item is also subject for continuation in the follow-up development project.

GRS's work on ASTEC, developed together with IRSN, has been focussed on containment phenomena and singular extensions with relation to BWR in the modules CPA (thermal hydraulics in the containment), MEDICIS (molten core/concrete interactions, MCCI), and on the coupling between CESAR (primary circuit) and CPA. The DCH model which was provided in ASTEC in the frame of RS1185 has been extended with calculations of chemical reactions and heat transfers between airborne melt droplets and atmosphere and has been validated by post-test calculations of DCH experiments performed in the DISCO-facility at KIT.

Furthermore, the models and correlations for passive autocatalytic recombiners (PAR) of the types “AREVA” and “AECL” available in COCOSYS have been ported to ASTEC/CPA, and a user's guide has been provided.

For the simulation of MCCI under flooded conditions the simplified model for boiling heat transfer at the melt/water interface has been adopted from COCOSYS to ASTEC/MEDICIS and successfully tested.

In the frame of the EU project JASMIN, which has the objective to extend ASTEC for the application to sodium cooled fast reactors (SFR), appropriate models in CONTAIN for sodium behaviour have been evaluated based on several test cases (FAUNA experiments on pool fires, ABCOVE experiments for sodium aerosol behaviour) for their applicability to ASTEC, motivated by past GRS work on the fast breeder reactor SNR-300. Based on these evaluations, requirements for further developments in ASTEC-Na have been identified.

Test calculations have been performed with the ASTEC modules CESAR, for the primary circuit, and CPA, for the containment, in application to the German BWR of building line ’69. Here, the performance of the coupling of both modules to this reactor type was demonstrated in principle. Moreover, some model differences in COCOSYS and ASTEC/CPA which had caused differences in temperature evolution in the wetwell within an application to a German BWR type ’72 were clarified.

From the investigations performed on the retention of fission products in water pools (pool scrubbing) and on the model SPARC related to this, it has been concluded that numerous single phenomena are modelled in SPARC with a high degree of detail but which cannot be validated separately. New efforts for the continuation of model validation are reasonable only in case of further improvements in the experimental data basis, for which the international progress in R&D should be pursued.

In the frame of EU-SARNET2 (finished in March 2013), GRS has participated to the work package WP4 with ASTEC related contributions to: User Workshop, conference (e. g. ERMSAR 2013) and journal papers (Annals of Nuclear Energy, Nuclear Engineering and Design), updates of documents related to new release versions of ASTEC, application calculations to a PWR of type KONVOI, support of external code users, tutoring of new ASTEC users.

In the frame of the EU-CESAM project GRS participated in the acquisition of status-quo and on the updating of international R&D for the topics: filtered containment venting, pool scrubbing, effectiveness of NIS-PAR, and MCCI, in each case with regard to

model approaches suitable for ASTEC. In CESAM numerous ASTEC users have joined, who have already been participant to SARNET2.

Substantial contributions have been provided for the editing of two OECD/CSNI state-of-the art-reports: 1) on MCCI (incl. consideration of coolability issues) and 2) on the effectiveness of filtered containment venting systems.

For the satisfaction of external partners using COCOSYS or ASTEC, and not at least as an important means for quality assurance, appropriate efforts have been undertaken to support users and asses the feedback from the application of the codes. With the objective to ensure the international acceptance and continuity or even to broaden the utilization of COCOSYS, it is regarded as necessary to consolidate the code with regard to quality of source coding, documentation, and user friendliness. This is one of the important objectives of the follow-up code development project.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Die GRS entwickelt zur deterministischen Analyse aktueller Fragestellungen der Reaktorsicherheit eigene Analysemethoden bzw. Codes. Die bereit gestellten Rechenprogramme der GRS decken dabei ein umfassendes Spektrum der in der Reaktorsicherheitsforschung untersuchten Phänomene ab. Die Rechencodes COCOSYS und ASTEC (siehe Abb. 1.1) als Simulationsmethoden für Stör- und Unfälle im Sicherheitsbehälter bzw. der Gesamtanlage nehmen eine zentrale Stellung im Hinblick auf Fragestellungen zur Simulation unfallbedingter Zustände im Sicherheitsbehälter bzw. zum integralen Unfallablauf in KKW ein.

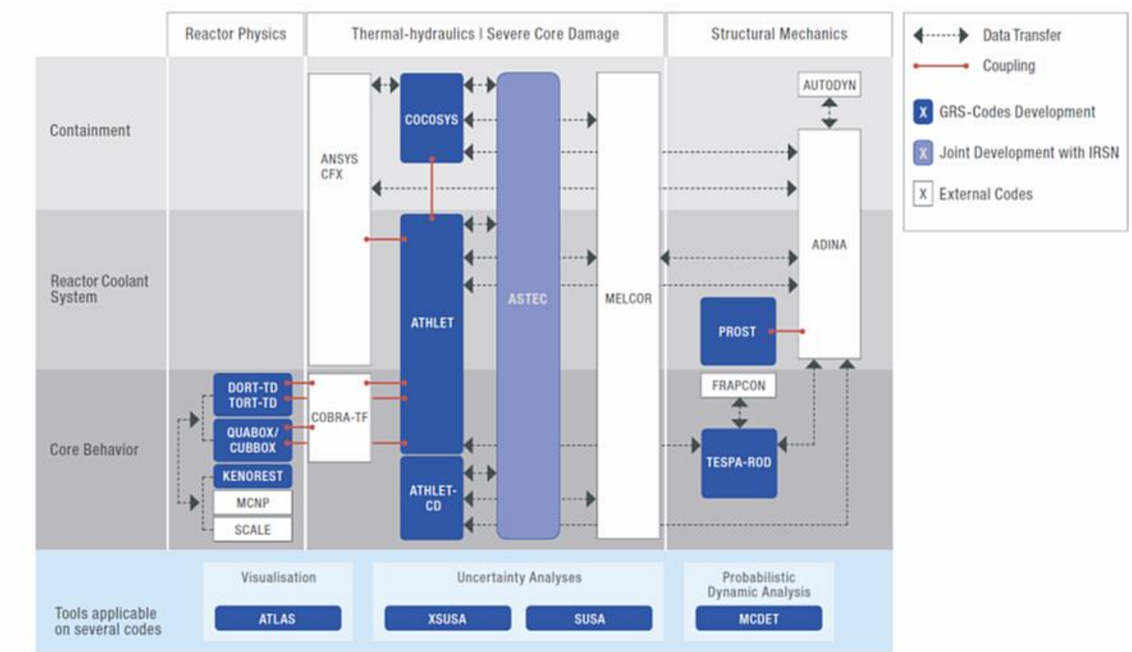


Abb. 1.1 Von der GRS entwickelte und genutzte technisch-wissenschaftliche Rechenprogramme /GRS 11/

COCOSYS (<u>Co</u>ntainment <u>Co</u>de <u>Sys</u>tem) ist das detaillierte Analysewerkzeug der GRS, das auf der Basis von weitgehend mechanistischen Modellen für Untersuchungen zu Stör- oder Unfallabläufen im Sicherheitsbehälter von LWR entwickelt wird.

ASTEC (<u>A</u>ccident <u>S</u>ource <u>T</u>erm <u>E</u>valuation <u>C</u>ode) ist ein integrales Analysewerkzeug, das Untersuchungen zu Stör- oder Unfallabläufen bezüglich des gesamten Anlagenverhaltens von LWR erlaubt und gemeinsam von IRSN und GRS entwickelt wird.

Grundgedanke des Sicherheitskonzeptes für den Betrieb von Kernkraftwerken ist es, das Eintreten von Stör- oder Unfällen durch eine angemessene Auslegung zu verhindern sowie die Auswirkungen von nicht komplett auszuschließenden Unfällen durch präventive und mitigative Notfallmaßnahmen zu minimieren. Daraus resultieren folgende Anforderungen an die genannten Simulationsprogramme:

- Analyse von anlagentypischen Szenarien zur Verbesserung des phänomenologischen Verständnisses möglicher Stör- und Unfallabläufe in LWR,
- Ermittlung möglicher radiologischer Freisetzungen aus dem Sicherheitsbehälter und angrenzender Gebäude in die Umgebung bei Unfallabläufen – dem Quellterm,
- Ermöglichung der Durchführung von deterministischen Unfallanalysen im Rahmen von probabilistischen Sicherheitsanalysen der Stufe 2 einschließlich von Studien zur Ermittlung von Unsicherheiten,
- Ermöglichung der Untersuchung von präventiven oder mitigativen Maßnahmen des Anlageninternen Notfallschutzes (Sicherheitsebene 4) bei Unfällen in LWR.

Übergeordnete Zielsetzung des Vorhabens ist es, die Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC für Vorgänge und Phänomene im Sicherheitsbehälter entsprechend des Fortschritts von Wissenschaft und Technik in Bezug auf die genannten Anforderungen weiterzuentwickeln. Dies ermöglicht der GRS sowie nationalen und internationalen Partnern Sicherheitsanalysen für Stör- und Unfallabläufe für ein breites Spektrum von kerntechnischen Anlagen auf hohem Niveau durchzuführen, unabhängige Sicherheitsaussagen zu treffen sowie Beiträge zur Erhöhung der Anlagensicherheit zu leisten.

Wesentliche Module bzw. physikalische Modelle der beiden Analysewerkzeuge COCOSYS und ASTEC wurden bereits in zurückliegenden, vom BMWi geförderten Vorhaben entwickelt. Die nachfolgend bezeichneten Arbeiten dienen zur Vervollständigung der Modellierung sowie zur Verbesserung von Modellen bzw. zur Erweiterung des Modellumfangs.

Maßgebliche der nachfolgend detailliert beschriebenen Arbeiten für das in der GRS entwickelte und validierte Programmsystem COCOSYS betreffen die detaillierte Berücksichtigung der Wechselwirkungen zwischen einzelnen Prozessen, z. B. den Wechselwirkungen zwischen Thermohydraulik <-> Aerosolverhalten <-> Iodchemie oder Thermohydraulik <-> Schmelze-Beton-Wechselwirkung.

Die von GRS bearbeiteten Themen bei der Weiterentwicklung von ASTEC betreffen im Wesentlichen Arbeiten zu Containment-Modellen im Modul CPA, die mit den Partnern, insbesondere IRSN, langfristig abgestimmt sind. Randbedingung bei der Entwicklung von Modellen für ASTEC im Unterschied zu prinzipiell stärker mechanistischen Codes, wie z. B. COCOSYS, ist die vorrangige Verwendung von schnell rechnenden Modellen, um die Rechenzeit in akzeptablen Grenzen zu halten.

Die Aktivitäten im Rahmen der internationalen Kooperation betreffen verschiedene Aspekte, insbesondere zunächst die Modellentwicklung von ASTEC und die entsprechende Beteiligung an den Steuerungsgruppen zur ASTEC-Entwicklung „Technical Review Group“ (TRG) und „Steering Committee“ (SC). Die Entwicklung von ASTEC war darüber hinaus auch der Hauptgegenstand der Zusammenarbeit im europäischen Exzellenznetzwerk SARNET2 des 7. EU-Forschungsrahmenprogramms sowie in dem daran anschließend gestarteten EU-Vorhaben CESAM. Ein primäres Ziel von SARNET2 war die Bereitstellung und Überprüfung von Modellen für ASTEC, das als integrales Analysewerkzeug die Rolle eines europäischen Referenzcodes (z. B. im Vergleich zu dem US-amerikanischen Rechencode MELCOR) einnimmt. Nach Ende von SARNET2 wird der fachliche Austausch insbesondere zur Planung zukünftiger internationaler Projekte auch auf der Plattform NUGENIA fortgeführt.

Darüber hinaus erfolgten Beteiligungen an den OECD/NEA-Vorhaben OECD-STEM (Source Term Evaluation and Mitigation), OECD-BIP2 (Behaviour of Iodine Project 2) sowie OECD-THAI2 (Themohydraulic, Hydrogen, Aerosol, Iodine), in denen Experimente durchgeführt werden, die für die Modellentwicklung, insbesondere für COCOSYS, von hoher Bedeutung sind.

Die in diesem Vorhaben durchgeführten Arbeiten zu COCOSYS und ASTEC verteilten sich auf die folgenden Arbeitspakete:

- **AP1**: Weiterentwicklung von COCOSYS
- **AP2**: Weiterentwicklung von ASTEC
- **AP3**: Querschnittsaufgaben
- **AP4:** Projektmanagement und Dokumentation

2 Weiterentwicklung von COCOSYS

2.1 Entwicklungsstand von COCOSYS und Aufgaben im Vorhaben

Zielsetzung von COCOSYS ist die Simulation aller wesentlichen Phänomene, Prozesse und Zustände im Sicherheitsbehälter bzw. dem Reaktorgebäude von KKW, die während Transienten oder Unfälle auftreten können. Abdeckend sollen auch Auslegungsstörfälle simuliert werden. Ein Schwerpunkt in COCOSYS ist neben der Verwendung möglichst mechanistischer Modelle eine weitgehende Berücksichtigung von Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen Phänomenen, wie z. B. zwischen der Thermohydraulik, der Wasserstoffverbrennung und dem Aerosol- und Nuklidverhalten. Das Programmsystem ist in mehrere sogenannte Hauptmodule aufgeteilt (Abb. 2.1) und kann mit weiteren Programmen (ATHLET-CD, LAVA, CoPool, ATLAS) gekoppelt werden.

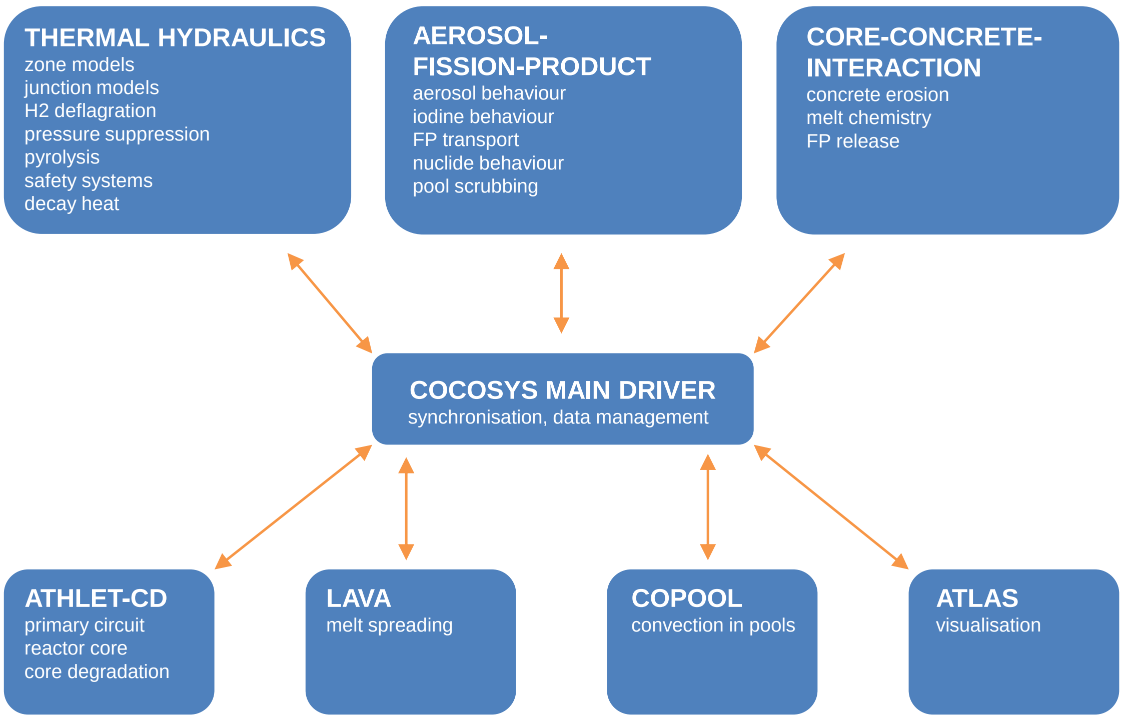


Abb. 2.1 Struktur von COCOSYS

Jedes Hauptmodul ist ein eigenständig ausführbares Programm, zuständig für einen bestimmten Bereich der Gesamtproblematik, z. B. Thermohydraulik, Spaltprodukttransport, Schmelze-Beton-Wechselwirkung (Core-Concrete-Interaction). Die Kommunikation zwischen diesen Hauptmodulen wird durch den COCOSYS-Treiber (COCOSYS Main Driver) mittels des Prozesskommunikationscodes PVM (Parallel Vir-

tual Machine) realisiert. Der COCOSYS-Treiber organisiert und steuert den Berechnungsablauf. Die Berechnung der Gesamtproblematik durch die einzelnen Hauptmodule erfolgt so, dass die Kopplung der Hauptmodule auf Zeitschrittebene erfolgen kann und der Umfang der auszutauschenden Größen relativ gering ist.

Die COCOSYS-Hauptmodule verfolgen prinzipiell den Lumped-Parameter-Ansatz, bei dem die betrachteten Raumbereiche (z. B. im Containment) vom Nutzer in verschiedene Zonen unterteilt werden, wobei innerhalb eines Zonenvolumens der Zustand des System nicht ortsveränderlich ist, sondern durch einen einzigen Satz von Zustandsvariablen (z. B. Druck, Temperatur und Stoffmengen im Bereich der Thermohydraulik) gekennzeichnet wird. Phänomene, die innerhalb eines Zonenvolumens auf einen ortsabhängigen Prozesses zurückgehen (z. B. Wärmeübergang in der Temperaturgrenzschicht) werden durch korrelative Ansätze in Abhängigkeit der Zonenvariablen angenähert. Dort, wo dieser Lumped-Parameter-Ansatz die Vorgänge nicht adäquat beschreiben kann, müssen höher auflösende Methoden zum Einsatz gebracht werden, Das betrifft z. B. die Ausbreitung einer Schmelze in einem Raum (mit dem Modul LAVA in Abb. 2.1) oder die Konvektion in tiefen Wasservorlagen (mit dem Modul CoPool in Abb. 2.1).

COCOSYS wird außer von der GRS auch von den folgenden deutschen Einrichtungen:

- AREVA Erlangen, AREVA Offenbach, Becker Technologies Eschborn, FZ Jülich, FZ Rossendorf, Hochschule Zittau, ITWM Fraunhofer Kaiserslautern, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Ruhr-Uni-Bochum, RWTH Aachen, TÜV Nord, TÜV Nord SysTech, TÜV Süd, Vattenfall Europe

und den folgenden internationalen Instituten (in alphabetischer Reihenfolge nach Ländern geordnet):

- ANRA, NRSC (Armenien), ENPRO (Bulgarien), SNPRI/CNPRI (China), FORTUM (Finnland), DCNS (Frankreich), Uni Pisa (Italien), LEI (Litauen), EREC, IBRAE, NIKIET, Rostechnadzor, SEC NRS (alle Russland), NRA (Slowakei), NRI Rez (Tschechien), Energorisk, SSTC (beide Ukraine), NUBIKI (Ungarn), JIPNR Sosny (Weißrussland)

genutzt. COCOSYS hat für deutsche und europäische Anlagentypen vorrangig der Generation II und III (z. B. DWR KONVOI, SWR-69, SWR-72, WWER 440 und 1000, RBMK) aber auch bereits für die Generation III+ (z. B. EPR) mittlerweile einen sehr gu-

ten Anwendungsstand erreicht. Dazu haben auch die Arbeiten im Vorhaben beigetragen, wobei die nachfolgend aufgeführten Einzelzielsetzungen verfolgt wurden, deren Ergebnisse anschließend beschrieben werden:

- **AP1.1 Auffüllen von Zonen mit Wasser**
  Die Möglichkeiten zur Anwendbarkeit von COCOSYS wurden bezüglich der Flutung von Raumbereichen in Reaktoranlagen erweitert. Dazu wurden generische Modellerweiterungen zur Berücksichtigung der kompletten Flutung von miteinander verbundenen Raumbereichen im SB zur Verfügung gestellt.

- **AP1.2 Modellverbesserungen zu quelltermrelevanten Phänomenen**
  Ausgewählte Modelle in COCOSYS zur Beschreibung des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens wurden im Hinblick auf quelltermrelevante Phänomene und unter Nutzung der Erkenntnisse aus aktuellen nationalen (THAI-IV, -V) und internationalen experimentellen Forschungsvorhaben (OECD-THAI2, OECD-BIP2, OECD-STEM) verbessert und zielgerichtet ergänzt. Modellergänzungen und Modellverbesserungen wurden z. B. zum Einfluss des radiolytisch gebildeten Ozons auf die Iodchemie sowie zum Feuchteeinfluss bei der Wechselwirkung von Iod mit Farbanstrichen (basierend auf THAI-Ergebnissen) und zur Zersetzung der Iodaerosole CsI und IOx (basierend auf OECD-STEM-Erkenntnissen) durchgeführt.

- **AP1.3 Aktualisierung der Code-Infrastruktur**
  COCOSYS wurde im Hinblick auf seine interne Modellstruktur und die Schnittstellen zwischen den Modellen kontinuierlich aktualisiert und verbessert, um wachsenden Anforderungen an die Qualität des Codes und die zukünftige Integration neuer Modelle zu genügen. Insbesondere wurden die in RS1185 durchgeführten Arbeiten zur Umstellung des Moduls AFP für das Aerosol- und Spaltproduktverhalten auf neue Datenstrukturen für die konsistente Bilanzierung von Aerosolen und Spaltprodukten fortgesetzt.
  Ferner wurde das bei ITWM in Kaiserslautern in Entwicklung befindliche Modell CoPool zur dreidimensionalen Simulation der Konvektion und Temperaturverteilung in einem Wasserpool an COCOSYS angebunden.
  Die Kopplung zwischen COCOSYS und ATHLET-CD wurde verbessert und mit der Anbindung von ATHLET-CD in Bezug auf das Versagen des Reaktordruckbehälters und den Austrag von Schmelze in das Containment begonnen.

2.2 Auffüllen von Zonen mit Wasser

Ausgangssituation

Gemäß dem Lumped-Parameter-Ansatz von COCOSYS werden z. B. Raumbereiche innerhalb des Containments vom Nutzer in eine festzulegende Anzahl von Zonen unterteilt, die untereinander durch atmosphärische Verbindungen und Drainageverbindungen zum Wassertransport verbunden sind. Das Nicht-Gleichgewichtsmodell in COCOSYS hatte bislang die Berücksichtigung von Wasserpools innerhalb einer Zone in COCOSYS unter der Annahme gestattet, dass der mit Wasser gefüllte Zonenanteil klein im Vergleich zur gesamten Zonengröße ist. Im Verlauf von Stör- oder Unfällen im Containment ist es aber nicht auszuschließen, dass Raumbereiche oder Zonen komplett mit Wasser aufgefüllt werden können. In Abhängigkeit vom Design der Anlage und dem Unfallverlauf ist dies z. B. in DWR vom Typ KONVOI der Sicherheitsbehältersumpf. In SWR können diese Raumbereiche oder Zonen Bereiche der Kondensationskammer sein. Auch Analysen mit vollständiger Flutung eines BE-Abklingbeckens gehören dazu. Darüber hinaus werden in zukünftigen Reaktoranlagen Maßnahmen zur Beherrschung des Unfalls eingesetzt, die z. B. im AP1000 die Flutung der Reaktorgrube zur Kühlung des RDB von außen vorsehen oder bei WWER-1000/466 die Flutung des Core Catchers nach Schmelzeaustrag aus dem Reaktor.

Dem musste bisher durch eine entsprechende Nodalisierung der Anlage Rechnung getragen werden, oder es mussten „Workarounds“ verwendet werden, die eine quasi vollständige Flutung von Zonen zuließen. Diese bestand in der Vorgabe von künstlichen atmosphärischen Verbindungen (rohrartige Verbindung) von einer mit Wasser „gefüllten“ Zone zu dem Gasraum der darüber befindlichen Zone (vgl. Raume R5 und R6 eines DWR Sumpfes in Abb. 2.2) in Verbindung mit der Verwendung von virtuellen Füllstandstabellen. Diese virtuelle Füllstandstabelle sorgte einerseits dafür, dass die tatsächliche Wassersäule bei der Berechnung des Druckes in der Zone berücksichtigt wird, andererseits wurde beim Füllen der Zone mithilfe dieser Füllstandstabelle vermieden, dass das Zonenvolumen zu 100 % aufgefüllt wurde, was zum Absturz der Analyse führen würde.

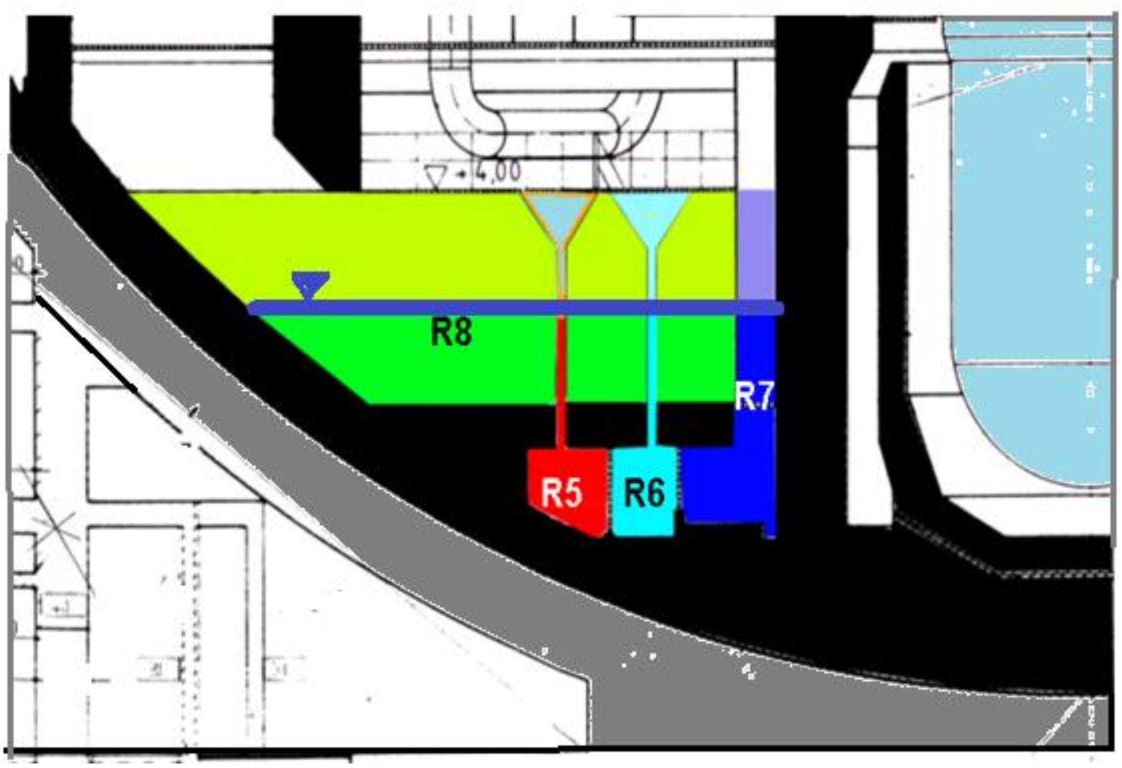


Abb. 2.2 Bisheriger Workaround für das komplette Auffüllen von Zonen (R5 und R6) unter Verwendung von rohrartig verlängerten Zonenvolumina

Ein wesentlicher Nachteil bei diesem Workaround bestand in der künstlichen direkten Verbindung der Atmosphäre zwischen den unten liegenden Zonen (R5 und R6) mit dem restlichen Volumen des SB über die Verbindung mit der Zone R8. Im Fall siedender Zustände in R5 und R6 würde über diese Verbindung auch Dampf direkt über die Zone R8 in den SB freigesetzt werden, was unrealistisch ist. In der Realität könnte entstehender Dampf nur durch die Wasservorlage in R7 entweichen, und würde dort kondensieren, solange die Wasservorlage dort noch unterkühlt ist. Dies führt zu systematischen Fehlern in der Simulation, so dass eine Modellerweiterung generell erforderlich wurde.

Konzept zum vollständigen Auffüllen von Raumbereichen

Für das vollständige Auffüllen von Raumbereichen / Zonen im Sicherheitsbehälter mit Wasser wurde eine generische Modellergänzung bereitgestellt. Diese Modellerweiterung hat zukünftig Auswirkungen auf die Datensatzerstellung im Hinblick auf bestehende Verbindungen zwischen einzelnen Zonen, da eine Separation von atmosphärischen Verbindungen und Drainageverbindungen nicht mehr sinnvoll ist.

Die Konzeption wurde so gestaltet, dass ein Anwender nur geometrische bzw. technische Daten für die Simulation vorgeben muss. Bei der Konzeption wurde berücksichtigt, dass Wandstrukturen teils mit einem Wasserpool und teils mit der Atmosphäre verbunden sind, solange der Raum nicht komplett gefüllt ist. Dies erfordert prinzipiell eine automatische Unterteilung in mehrere Wandelemente entsprechend des Füllstandes in der Zone. Diese automatische Unterteilung ist aber im Rahmen der hier erstellten generischen Modellerweiterung noch nicht erstellt worden, da eine ähnliche Problemstellung im Rahmen der CoPool-Anbindung besteht (vgl. Abschnitt 2.4.3) und auf der dortigen Erfahrung aufgebaut werden soll.

Im Folgenden werden die Modellergänzung in COCOSYS im Detail sowie die notwendigen Nutzereingaben beschrieben. Anhand einfacher Testbeispiele und Plausibilitätsüberprüfungen wird die Korrektheit der neuen Optionen im Nicht-Gleichgewichtsmodell gezeigt. Abschließend werden offene Fragen und weitere sinnvolle Entwicklungsschritte diskutiert.

Die Erweiterungen zum Zonenfluten in COCOSYS betreffen das Nicht-Gleichgewichtsmodell und die Vereinigung von atmosphärischen und flüssigkeitsführenden Verbindungstypen in einem neuen Verbindungstyp `ATM_FULL`. Diese Modifikationen werden im Folgenden erläutert.

Änderungen im Nicht-Gleichgewichtsmodell

Das Nicht-Gleichgewichtsmodell wurde um die Möglichkeit erweitert, den gasförmigen Zonenteil 1 auszuschalten, sobald eine Zone komplett geflutet ist. Der Gaszonenteil wird gelöscht, wenn innerhalb des Integrationsschrittes

$$m_{\mathrm{gas}} < \epsilon_m V_z \tag{2.1}$$

bzw. außerhalb des Integrationsschrittes

$$m_{\mathrm{gas}} < 1{,}1\ \epsilon_m V_z \tag{2.2}$$

m_{gas} steht für die gesamte Gasmasse in der Zone, ϵ_m ist die Fehlertoleranz der Differentialgleichungen für die Masse in der FEBE und V_z ist das Zonenvolumen.

Alle Differentialgleichungen, die den Zonenteil 1 betreffen, werden in diesem Fall deaktiviert. Die Felder des Zonenteils 1 bleiben erhalten und mit `ZPHASE(1) = 'DUMMY'`

wird dem Zonenteil 1 eine Pseudophasenkennzeichnung zugeordnet, um diesen Fall für das weitere Berechnungsverfahren zu kennzeichnen.

Für den Massentransport zwischen den Zonen wurde ein neuer Verbindungstyp eingeführt, der eine Kombination aus gas- und flüssigkeitsführenden Verbindungen ist. Unter Nutzung dieses neuen Verbindungstyps kann die bisherige Doppelung in COCOSYS von Verbindungen für Gas- und Flüssigkeitstransport damit entfallen. Der Verbindungstyp `ATM_FULL` setzt sich zusammen aus den bestehenden Verbindungstypen `ATMOS_JUN` für den Gastransport und `SUMP_BAL` für vertikal bzw. `DRAIN_BOT` für abwärts strömende Flüssigkeiten. Diese Verbindungstypen sind für die getrennte Nutzung von Verbindungen in COCOSYS verfügbar und dokumentiert /KLH 00/. Die Orientierung der einzelnen Verbindungen wird in Abhängigkeit der Geometrie der einzelnen Zonen und ihrer Orientierung zueinander berechnet. Die benutzen Transportgleichungen sind im Referenzhandbuch zu COCOSYS V1.2 /KLH 00/ im Zusammenhang mit dem jeweiligen Verbindungstyp beschrieben und sollen hier nicht wiederholt werden. Der neue Verbindungstyp `ATM_FULL` erlaubt in Abhängigkeit vom Flüssigkeitsstand in den Zonen einen gleichzeitigen Transport von Gas und Flüssigkeit. Die Wechselwirkung zwischen den beiden Phasen ist hier vernachlässigt, es ist also kein Zweiphasentransport modelliert. Zweiphasige Effekte könnten aber in Zukunft prinzipiell durch einen effektiven Faktor (ähnlich dem 'Slip'-Faktor in der DCH-Modellierung) berücksichtigt werden.

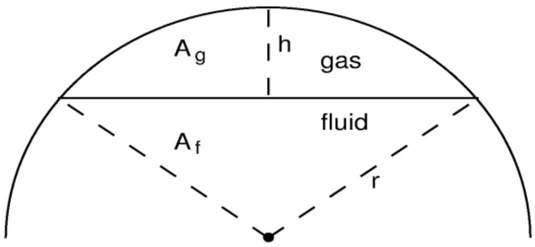


Abb. 2.3 Skizze zum Massentransport in teilgefluteten horizontalen Verbindungen; A_g und A_f sind die Querschnittsflächen der Gas- bzw. Flüssigkeitsmassen

Während des gleichzeitigen Transports von Gas und Flüssigkeit muss der jeweilige Flussquerschnitt berechnet werden. In dem generischen Verbindungstyp `ATM_FULL` wird ein kreisförmiger Querschnitt für die Verbindung angenommen und es gilt dann für den für horizontalen Gastransport zur Verfügung stehenden Querschnitt

$$A_g = r^2 \arccos\left(1 - \frac{h}{r}\right) - \sqrt{2rh - h^2}(r - h) \tag{2.3}$$

In Gl. 2.3 ist r der Radius der Verbindung und h die Höhe des Scheitelpunktes des Verbindungsquerschnittes über der aktuellen Flüssigkeitshöhe, s. a. Abb. 2.3.

Die Querschnittsfläche der Flüssigkeit in der Verbindung ergibt sich aus $A_f = A - A_g$, wobei A die gesamte Querschnittsfläche der Verbindung ist. Für vertikal nach unten gerichteten Massentransport werden die Querschnittsflächen der einzelnen Phasen nach den in Kapitel 5.3 des Referenzhandbuchs zu /KLH 00/ beschriebenen Gleichungen berechnet.

Abweichend von den vereinfachenden Annahmen eines kreisförmigen Flussquerschnittes gibt es Anwendungen, in denen ein rechteckiger Schlitz als Querschnitt vorliegt (z. B. bei RBMK-150: Schlitze der Abmessung 0,05 m x 1,20 m), wo die obige Annahme einen anderen Überlauf von Wasser bewirken wird. Dies ist für einen Übertragung dieses generischen Typs auf technische Anwendungen zu bedenken (z. B. durch zusätzliche Eingabeoptionen für den Typ des Querschnitts).

Die Umschaltprozesse für die verschiedenen Transportprozesse finden in Abhängigkeit von den treibenden Kräften zwischen den Zonen (Druckdifferenz, geodätische Höhendifferenz) sowie den Wasserständen in den Zonen statt. Neben dem Ausgleich der Wasserstände in zwei verbundenen Zonen gleichen Gasdruckes, sind auch komplexere Fälle erfasst. So ist zum Beispiel über eine waagerechte Verbindung auch eine Strömung in Richtung einer Zone mit höherem Wasserstand möglich, vorausgesetzt der Gasdruck in der Zone mit dem niedrigeren Wasserstand ist entsprechend groß und treibt den Vorgang an.

Ebenfalls möglich ist so eine Wasserströmung nach oben und entgegen der Schwerkraft. Die Gleichungen für aufwärtsströmende Flüssigkeiten werden dann aktiviert, wenn die untere, der beiden verbundenen Zonen komplett geflutet ist. Da die Flüssigkeit in der gefluteten Zone inkompressibel ist, wird der Massenstrom für den Aufwärtsfluss bestimmt durch den Massenfluss der einströmenden Masse in die untere Zone.

Im generischen Testdatensatz (Abb. 2.4) bedeutet dies, dass, sobald R2 von R1 aus geflutet ist, die Flüssigkeit weiter in Richtung R3 steigt. Der aufwärtsgerichtete Mas-

senstrom in der Verbindung V23 ist dann durch die Differentialgleichung in der Verbindung V12 indirekt bestimmt. Für den Fall, dass die Zone R1 in diesem Moment ebenfalls komplett geflutet ist, wäre der Massenstrom in V23 bestimmt durch den Massenstrom in V41.

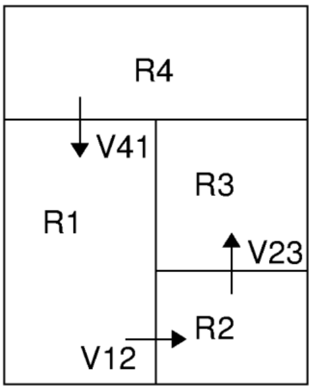


Abb. 2.4 Testbeispiel, generisches Zonenfluten

Die Änderungen, die das Zonenmodell betreffen, sind in die entsprechenden, bereits vorhandenen Routinen eingebaut. Der neue Verbindungstyp ist im Modul `vfull.f90` enthalten. Alle bisher vorhandenen Verbindungstypen können ohne die Möglichkeit des Zonenflutens weiterhin ohne Einschränkung verwendet werden. Im Folgenden soll die Plausibilität der Implementierung an ausgewählten Testfällen gezeigt werden. Als Grundlage dient die in Abb. 2.4 gezeigte Geometrie die auf verschiedene Weise modifiziert wurde, um verschiedene denkbare Fälle zu überprüfen.

Überprüfung der Modellierung

Um den horizontalen Flüssigkeitstransport zu testen, wurden zunächst die Zonen R1, R2 und R3 gleich dimensioniert (10 m^3, Grundfläche 1 m^2) und die Zone R1 anfänglich mit 1800 kg Wasser gefüllt. Die sehr viel größere Zone R4 ist auf einem Anfangsdruck von 1,1 bar gesetzt, alle anderen Zonen sind auf 1,0 bar festgelegt. Der Wasserstand in den Zonen ist in Abb. 2.5 gezeigt und es zeigt sich das zu erwartende Verhalten. Das Wasser fließt von R1 nach R2 und durch den anfänglich höheren Druck in R4 und R1 gegenüber R2 und R3 ist der Wasserstand im Gleichgewicht in R2 höher als in R1. Die Ergebnisse sind außerdem invariant unter Vertauschung des Anfangs- und Endpunktes der Verbindung V12. Dies gilt für alle Optionen der FEBE (IFTRIX, JUNCTION INST).

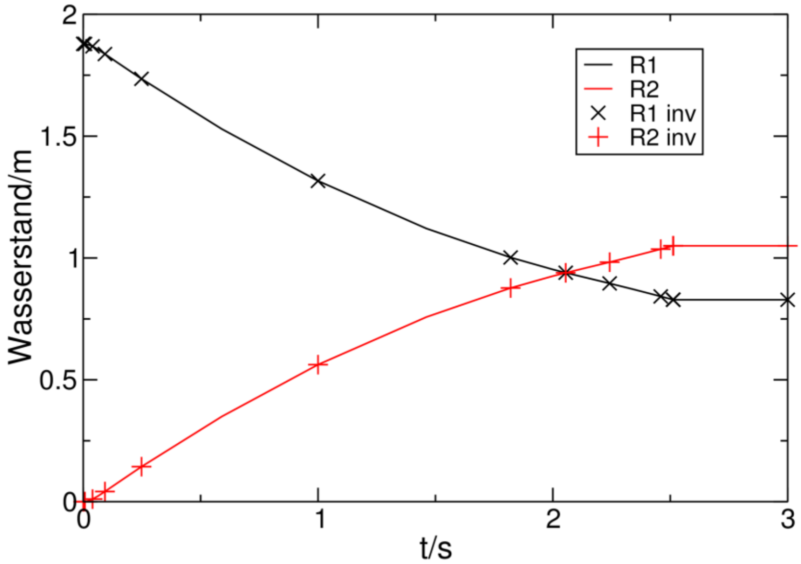


Abb. 2.5 Wasserstand (bezogen auf den Boden von R1 bzw. R2) für den Test der horizontalen Verbindung; die Symbole bezeichnen den Fall der getauschten Anfangs- und Endpunkte für die Verbindung V12

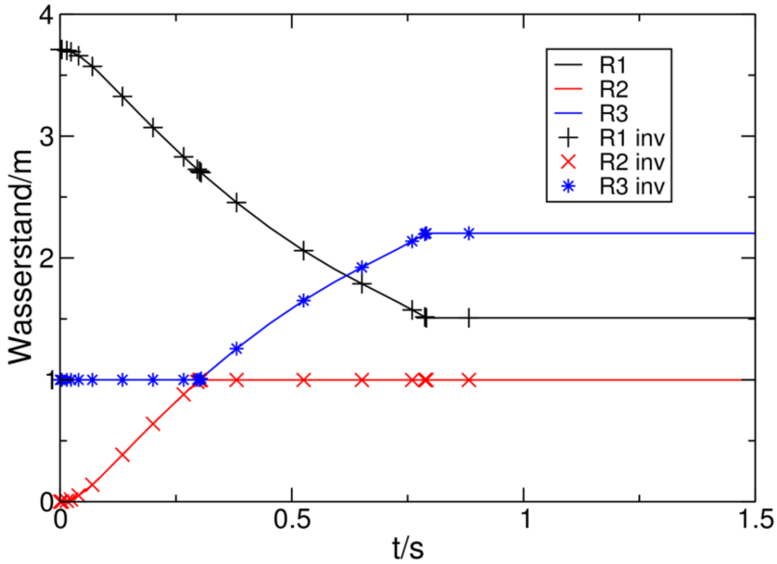


Abb. 2.6 Wasserstand (bezogen auf den Boden von R1 bzw. R2) für den Test möglicher Transportrichtungen der Flüssigkeit; die Symbole bezeichnen den Fall der getauschten Anfangs- und Endpunkte für die Verbindung V12

Um weitere mögliche Transportrichtungen zu testen, werden die Dimensionen der Zonen im Testbeispiel (Abb. 2) so gewählt, dass R1 = 10 m^3, R2 = 1 m^3, R3 = 100 m^3 (Grundfläche für alle Zonen 1 m^2) groß sind. Der Druck in diesen Zonen liegt wieder bei 1,0 bar und die sehr viel größere Zone R4 hat wieder einen Druck von 1,1 bar. Die Zo-

ne R1 ist anfänglich mit 3700 kg Wasser gefüllt. Die Ergebnisse in Abb. 2.6 folgen der physikalischen Erwartung. Das Wasser fließt horizontal in R2. Wenn diese Zone komplett geflutet ist (bei einem Wasserstand von 1 m), beginnt die Flutung der über R2 liegenden Zone R3 bis der stationäre Zustand erreicht ist. Die im stationären Zustand erreichte Höhendifferenz in den Wasserständen entspricht wieder der Druckdifferenz zwischen den Zonen. Die Ergebnisse sind außerdem invariant unter Vertauschung des Anfangs- und Endpunktes der Verbindungen.

Weitere verschiedene Tests und Vergleiche zur Korrektheit der Implementierung sind aufbauend auf den gezeigten Beispielen durchgeführt worden und werden hier nicht genannt.

Für den neuen Verbindungstyp ist innerhalb der Verbindungsdefinitionen eine modifizierte Nutzereingabe wie folgt erforderlich:

```
P---- VNAME
      ATM_FULL
----- FULL_JUN
      VZBEG     VZEND    VAREA  VLEN      VZETA1  VZETA2  VZEL
      ELEV      VMWRST     LBALDP
```

Die einzelnen Größen sind ausführlich im COCOSYS-Benutzerhandbuch erläutert.

Für den neuen Verbindungstyp ist analog zu den vorhandenen Ausgaben für existierende Verbindungen die entsprechende Ausgabe angelegt worden.

Beim Testen der neuen Implementierung zeigte sich, dass die bisherige Umsetzung für atmosphärische Verbindungen nicht vollständig invariant unter Vertauschung von Anfangs- und Endzone der Verbindung war, da für den Fall eines verschwindenden Massenstroms (`VG = 0.D0`) die Kraftrichtung immer von Anfangs- zu Endzone festgelegt wurde. Dies ist so nicht richtig, es muss vielmehr die Kraftrichtung in Abhängigkeit von der treibenden Kraft (hier der Druckdifferenz) festgelegt werden. Diese Änderung ist in den entsprechenden Routinen umgesetzt worden.

Unterteilung von Wänden in mehrere Teile

In der ursprünglichen COCOSYS Konzeption wird in der Regel davon ausgegangen, dass die Oberfläche von Wänden (vertikale Struktur) mit dem Atmosphären-Zonenteil der entsprechenden anliegenden Zone verbunden ist. Nur Böden können vollständig mit Wasser bedeckt sein. Ändert sich aber der Wasserstand in einer Zone maßgeblich,

wird die Wandfläche teilweise von Wasser bedeckt und die Wandoberfläche ist in die Bereiche ober- und unterhalb der Wasseroberfläche zu unterteilen. Dies kann entsprechend zu unterschiedlichen Temperaturen in den jeweiligen Bereichen führen, so dass die Wand in mehrere Segmente unterteilt werden muss. Das nun in COCOSYS umgesetzte Konzept ist in der Abb. 2.7 dargestellt. Dazu muss der Anwender die Höhenkote der Unter- und Oberkante der Wandstruktur angeben. Die entsprechende Struktur wird dann in bis zu drei Segmente eingeteilt, in Abhängigkeit des Wasserstandes rechts und links der Wand.

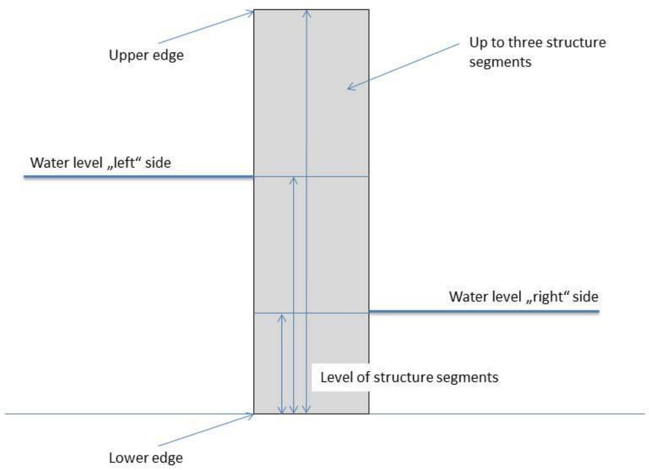


Abb. 2.7 Konzeption zur Unterteilung der Wände in Segmente

Da die Unterteilung variabel ist, wurde die Temperaturgleichung entsprechend erweitert. Ebenso werden die Wärmeübergänge für jedes Segment separat betrachtet. Weiterhin wird die Wärmeleitung entlang der einzelnen Schichten berücksichtigt. Kondensat, welches in den oberen Segmenten gebildet wird, wird zum tiefer liegenden Segment abgeleitet.

Die Umsetzung dieses Konzepts erforderte zahlreiche Änderungen im COCOSYS-Programm, da die Dimension zahlreicher Variablen erhöht werden musste, um die Segment-Nummer zu beschreiben. Ebenso wurden die Wärmeübergangsmodelle entsprechend ergänzt. Das Referenz- und Benutzer-Handbuch von COCOSYS wurden ergänzt. Hier sind Details zu den verwendeten Gleichungen zu finden.

Die Erweiterungen wurden anhand von Testbeispielen überprüft und separat dokumentiert. Sofern sich der Wasserstand in dem Testbeispiel nicht ändert, können die Ergän-

zungen mit den in V2.4 verfügbaren Modellen überprüft werden. Die Ergebnisse stimmen überein.

Die Ergänzungen werden ebenso für die Ankopplung von CoPool an COCOSYS benötigt, da der Wärmeübergang zwischen Sumpf und entsprechenden Oberflächen durch CoPool simuliert wird, wenn dieses Modul genutzt wird.

Ausblick

Sinnvolle Anschlussarbeiten im Rahmen des Nachfolgevorhabens sind:

– Bisher wird die räumliche Orientierung der Verbindungen über die Höhendifferenz der Zonenmittelpunkte berechnet. Dies sollte geändert werden, insofern der Nutzer reale Details der Verbindungsgeometrie vorgibt (z. B. Ein- und Auslasshöhe der Verbindungsunterkante, Verbindungsdurchmesser, Verbindungsbreite `VWIDTH`). Daraus sollte das Programm dann automatisch die Verbindungsorientierung berechnen. Die Verbindungslänge sollte der realen Verbindungslänge entsprechen. Der hydraulische Durchmesser oder die Länge von Propagationspfaden für das Wasserstoffverbrennungsmodul FRONT-Modell sollten dann automatisch abgeleitet werden.

– Der Nutzer sollte verschieden Formen für den Verbindungsquerschnitt mit gleichzeitiger Durchströmung von Wasser und Gas vorgeben können (bisher: kreisförmige Verbindung angenommen).

– Türen und Klappen sollten im neuen Modell beim Zonenfluten ebenfalls berücksichtigt werden. Hierzu muss die Öffnungscharakteristik einer teilüberfluteten Tür in Abhängigkeit vom Wasserstand berechnet werden. Ferner muss die durchgeführte Implementierung der Differentialgleichung für den Massenfluss so verallgemeinert werden, dass sie auch auf andere Verbindungstypen anwendbar wird. Die Wiederverwendung der entsprechenden Routine erleichtert später die Pflege und Weiterentwicklung des Systems, da Änderungen zentral erfolgen, und nicht für jeden Verbindungstyp einzeln vorgenommen werden müssen.

– Das Fluten von „virtuellen“ Zonen muss modelliert werden, d. h. von Zonen, die nur von unten durch aufsteigendes Wasser flutbar sind. In diesem Zusammenhang sollte ein Modell entwickelt werden, welches den Transport von vertikal nach unten strömendem Wasser durch virtuelle Zonen abbilden kann. Hierbei steht insbeson-

dere die mögliche Verdampfung in der virtuellen Zone während des Transports im Vordergrund.

- Eine Zusammenfassung von Gleichgewichts- und Nicht-Gleichgewichtsmodell sollte angestrebt werden.
- Eine Anpassung von Sichtfaktoren bei der Unterteilung von Wänden ist vorzunehmen.
- Die Ankopplung des Modells gefluteter Zonen an andere Modelle in COCOSYS sollte ausführlich erprobt werden, z. B. im Zusammenhang mit Pumpensystemen, Lüfter etc.
- Die Tests des Modells sind auf komplexere Anlagendatensätze auszubauen.
- Der Transport von im Wasser gelösten Spaltprodukten durch vorhandene Verbindungen zwischen mit Wasser gefüllten Zonen ist zu modellieren.

2.3 Modellverbesserungen zu quelltermrelevanten Phänomenen

Das “Aerosol Fission-Product” (AFP)-Hauptmodul ist zum Zwecke von Best-Estimate-Simulationen des Spaltproduktverhaltens im Sicherheitsbehälter von LWR entwickelt worden. Die beiden Hauptmodule THY und AFP berücksichtigen dabei insbesondere auch die Wechselwirkungen zwischen Containment-Thermohydraulik (THY) und dem Aerosol- und Spaltproduktverhalten (AFP). Die folgenden Ablagerungsvorgänge werden betrachtet: Sedimentation, diffusionsbedingte Ablagerung, Thermophorese und Diffusiophorese.

Das FIPHOST-Modul berechnet den Transport von Spaltprodukten innerhalb des Sicherheitsbehälters. Spaltprodukte werden als radioaktive Bestandteile der Aerosolpartikel und der nicht-kondensierbaren Gase behandelt, deren Masse aber in den Modellen vernachlässigt wird. Das Nuklidverhalten wird mit dem FIPSIO-Modul simuliert. FIPISO benötigt das (durch andere Rechenprogramme im Voraus berechnete) anfängliche Kerninventar und berechnet auf dieser Basis den Zerfall der Spaltprodukte als Zeitfunktion durch Verwendung etablierter Nuklidbibliotheken (analog zu ORIGIN). Das Modul AIM-3 simuliert die Iodchemie und enthält ungefähr 70 verschiedene Reaktionen. AIM-3 unterscheidet zwischen 16 Iodspezies in der Atmosphäre und 10 Iodspezies in Wasservorlagen. Es berechnet den Iodtransport zwischen Sumpf und Atmosphäre sowie auch zwischen den Räumen im SB. Die Rückhaltung von Aerosolen

beim Durchgang durch Wasservorlagen (Pool-Scrubbing z. B. in der Kondensationskammer eines SWR) wird durch das Modell SPARC-B berechnet.

In RS1185 wurden die Arbeiten zur Umstrukturierung des AFP-Moduls begonnen, diese sind hier weitergeführt worden. Eine wesentliche Zielsetzung dieser Umstrukturierung ist die zentrale, konsistente Bilanzierung von Aerosolen und Spaltprodukten, deren Verhalten innerhalb des SB durch unterschiedlichste Vorgänge, wie z. B. Ablagerungsprozesse (Sedimentation, Diffusiophorese und Thermophorese), Transportprozesse wie Abwaschen (Transport im Wasserfilm, Ablagerung in Wasservorlagen, Transport in Zusammenhang mit Drainage) und Transport in atmosphärischen Verbindungen bestimmt wird. Es kommen daher unterschiedlichste Teilmodelle für die Simulation des Gesamtverhaltens zum Einsatz, wobei die Bilanzierung jedoch zentralisiert, d. h. nicht in den Teilmodellen, vorgenommen wird.

2.3.1 Modifikation der O_3-Bildung in AIM-3

2.3.1.1 Hintergrund

In einem Luft/Dampf-Gemisch werden durch radioaktive Strahlung Radiolyseprodukte, wie z. B. Ozon (O_3), gebildet. Diese oxidieren unter anderem das gasförmige elementare Iod (I_2) zu Iodoxiden (IO_x). IO_x ist ein Aerosol, das aus sehr feinen Partikeln besteht. Diese sogenannte Iod/Ozon-Reaktion ist im Iodmodell AIM in COCOSYS semiempirisch modelliert /WEB 09/WEB 09. Bei der Nachrechnung von Versuchen hat sich das Teilmodell zur Bildung von Ozon als sehr unsicher herausgestellt. Vor allem die Übertragung von Laborergebnissen auf ein Reaktorcontainment bereitete Probleme. Das Modell zur Ozon-Bildung wurde daher analysiert und überarbeitet. Dabei wurde hauptsächlich der Einfluss der relativen Luftfeuchte auf die Ozon-Bildung korrigiert.

2.3.1.2 O_3 Modelle in AIM-3 und Verbesserungen

Die experimentelle Basis des Modells zu Bildung und Zersetzung von Ozon (PARIS-Tests) ist in /BOS 06/ und /BOS 08/ beschrieben. Die in AIM verwendete Darstellung ist in /WEB 09/ dokumentiert. Hier sind nur die zum Verständnis der durchgeführten Modifikationen wichtigen Zusammenhänge dargestellt.

Ozon ist der wichtigste Repräsentant der Radiolyseprodukte von Luft. In einen Reaktorcontainment befindet sich stets auch Wasserdampf.

$$\text{Luft / Dampf} + \gamma \underset{k(72)}{\overset{k(71)}{\rightleftarrows}} O_3\,(g) \qquad (2.4)$$

Die Bildung von Ozon wird durch seine gleichzeitige Zersetzung, die vom Wasserdampfgehalt abhängt, begrenzt. In AIM sind ein Bildungs-Term und fünf Zersetzungsterme modelliert. In der Reaktionsgleichung für Ozon (im Modell O3G) in AIM wurden im Wesentlichen zwei Änderungen (rot) vorgenommen:

(1) Die Sauerstoff-Konzentration wurde berücksichtigt.

(2) Die Abhängigkeit der O_3-Zersetzung von der relativen Feuchte wurde neu formuliert

$d\,O3G/dt = + k(71) \cdot D_G \cdot \rho_{O2}/\rho_{O2,0}$	Bildung of O_3	
$- k(1) \cdot STOFAC \cdot O3G \cdot I2G$	Abbau durch IO_x-Bildung	
$- f72neu \cdot k(72) \cdot O3G \cdot D_G$	radiolytische Zersetzung	(2.5)
$- f78neu \cdot k(78) \cdot O3G$	thermische Zersetzung	
$- k(82) \cdot Ap/VG \cdot O3G$	Zersetzung auf Farbe	
$- k(83) \cdot A_s/V_G \cdot O3G$	Zersetzung auf Stahl	

modifizierte bzw. neue Parameter (rot):

ρ_{O2} aktuelle Dichte bzw. Konzentration des Sauerstoffs in derContainment-Atmosphäre (g/l)

$\rho_{O2,0}$ Referenzdichte bzw. Konzentration des Sauerstoffs in normaler Luft bei PARIS-Bedingungen, $\rho_{O2,0} = 0{,}217$ g/l

Die modifizierten Parameter sind

$f72neu = 4{,}11E\text{-}2 \cdot \rho_{ST}$ statt $f72 = \exp(6{,}957\,(\rho_{ST} - 1))$

$f78neu = 8{,}15E\text{-}3 \cdot \rho_{ST}$ statt $f78 = \exp(8{,}685\,(\rho_{ST} - 1))$

Es wird ein linearer Einfluss der Dampfkonzentration auf die Zersetzung von O_3 angenommen. D. h. thermische und die radiolytische Zersetzung sind jetzt direkt proportional zur absoluten Konzentration des Dampfes in g/l. Die Umrechnung in mol/l ist im Koeffizienten enthalten. Die Dampfmenge wird so wie die O_2-Menge im Iodmodell AIM

nicht bilanziert. Bisher wurde eine viel zu starke (exponentielle) Abhängigkeit angenommen.

Die neuen Koeffizienten f72neu und f78neu basieren wie die alten auf Messwerten aus den PARIS-Experimenten, die bei einer Dampfkonzentration von 0,017 bzw. 0,2 g/l durchgeführt worden waren. Für Dampfkonzentrationen > 0,5 g/l sind die Koeffizienten jetzt stark reduziert (Abb. 2.8).

Der neue Faktor $\rho_{O2}/\rho_{O2,0}$ berücksichtigt eine Änderung der Sauerstoffkonzentration. Dabei wird angenommen, dass die O_2-Konzentration linear in die O_3-Bildungsrate eingeht. Damit lässt sich z. B. eine Sauerstoffverarmung, wie sie infolge des Rekombinator-Betriebes in einem Reaktorcontainment unter Unfallbedingungen zu erwarten ist, berücksichtigen. Auch können beliebige Sauerstoffkonzentrationen jetzt korrekt erfasst werden. So betrug die O_2-Konzentration in PHEBUS FPT1 nur 5 % /BOS 12/. In gewöhnlicher Luft ist die O_2-Konzentration im Mittel 20,95 Vol.-%.

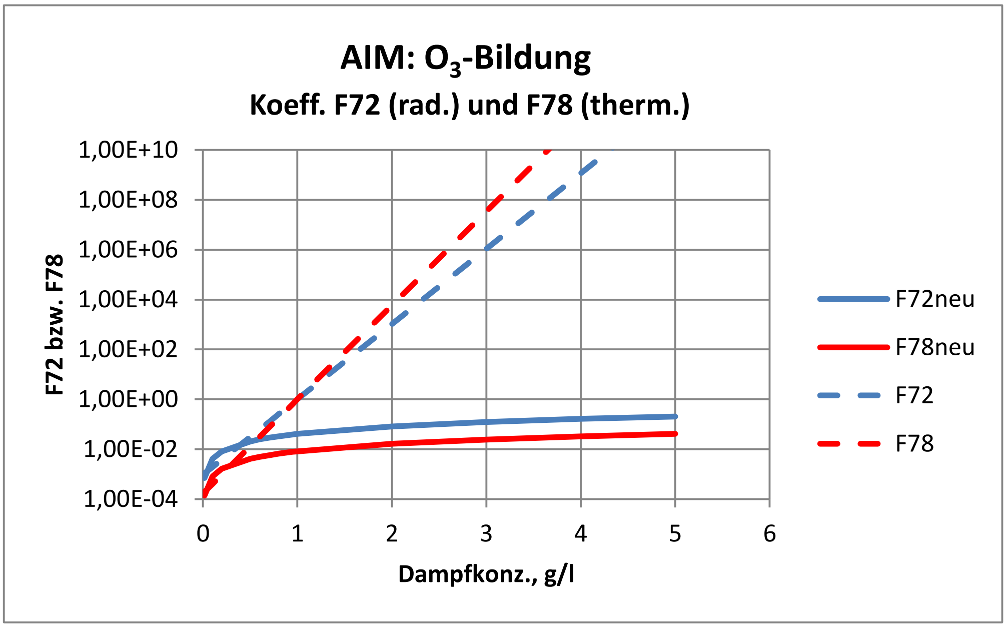


Abb. 2.8 Alte und neue Koeffizienten f72 und f78 (logarithmisch)

Die beschriebenen Programmänderungen wurden in COCOSYS-AIM implementiert und stehen in der Codeversion COCOSYSV2.4v3+ zu Verfügung.

2.3.1.3 Überprüfung anhand von PHEBUS FPT1

Die Modelländerung wurde anhand einer Simulation des PHEBUS FPT1 Experiments überprüft. Diese Rechnung diente auch als Referenzdatensatz für die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse zur Iodmodellierung /WEB 12/. Die Modelländerung zeigt einen moderaten Einfluss auf die Iodergebnisse. Durch die niedrigere Sauerstoffkonzentration (ca. 5 Vol.-% zu Beginn) ist die O_3-Konzentration (Abb. 2.9) entsprechend niedriger (rote Kurven). Die Korrektur fällt schwächer aus, als aufgrund der reduzierten O_2-Konzentration zu erwarten gewesen wäre (Faktor 0,24), da sich zusätzlich der geänderte Einfluss der Dampfdichte auf den thermischen und radiolytischen Abbau von O_3 bemerkbar macht.

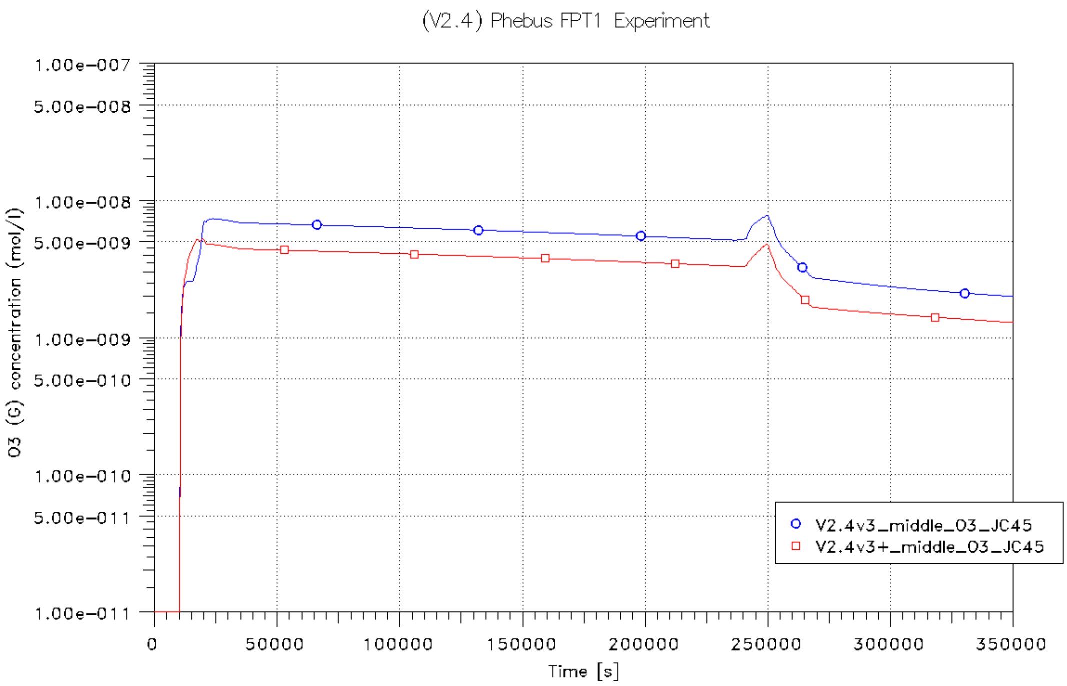


Abb. 2.9 Vergleich der Ozon-Konzentration

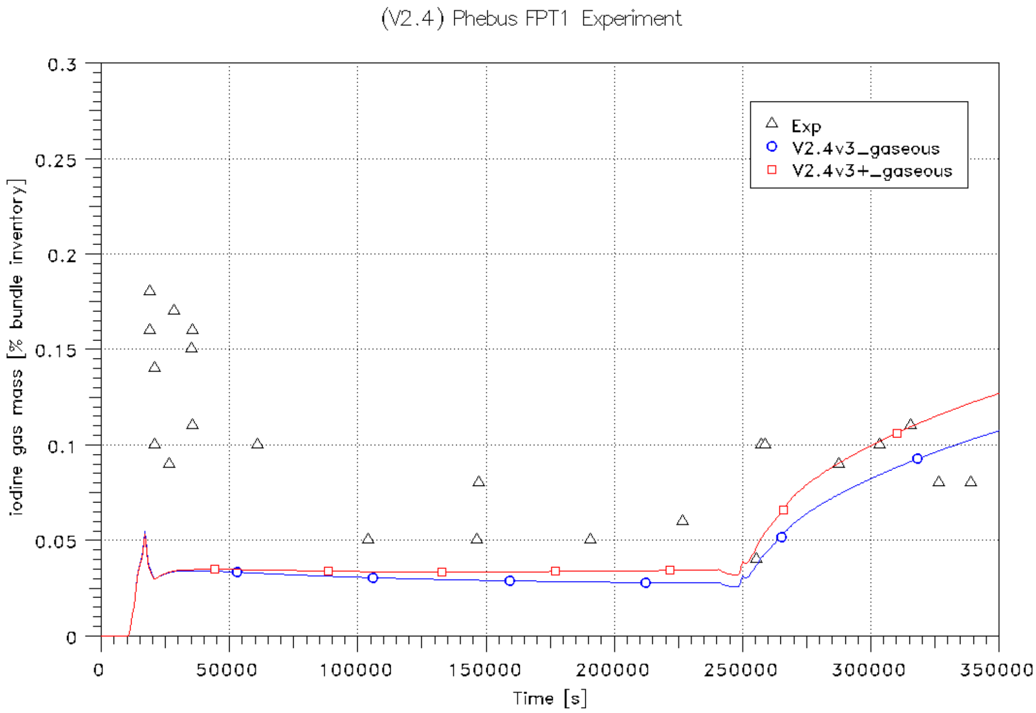


Abb. 2.10 Vergleich der gasförmigen Iod-Konzentrationen

Unter den Versuchsbedingungen vor dem Abwaschen bei t = 2,4E5 s (T = 110 °C, $\rho_{st,sat}$ = 0,83 kg/m^3, rF ≈ 75 %) ist die Dampfdichte ρ_{st} ≈ 0,62 kg/m^3 und damit der Abbau von O_3 deutlich geringer als mit der alten Version gerechnet. D. h., die O_3-Reduktion infolge der geringeren O_2-Konzentration in FTP1 wird teilweise durch den geringeren O_3-Abbau kompensiert. Die mit dem korrigierten Modell um ca. den Faktor 0.67 niedriger berechnete O_3-Konzentration ist daher plausibel.

Als Folge der reduzierten O_3-Konzentration ist die IOx-Konzentration etwas niedriger und die I_2-Konzentration in der Atmosphäre etwas höher (Abb. 2.10).

Unter Reaktorbedingungen bei starker Dampffreisetzung und kräftigem Druckaufbau im Containment hat die Korrektur einen deutlich stärkeren Einfluss als in FPT1.

2.3.1.4 Zusammenfassung

In AIM-3 wird zur Berechnung der Iodoxid-Bildung in einem Teilmodell die Ozon (O_3)-Konzentration bestimmt. Für Dampfkonzentrationen > 1 kg/m³, d. h. bei hohen Gesamtdrücken im Containment, wurden bisher die O_3-Konzentration und die Iodoxid-

Bildung stark unterschätzt. Diese Modellschwäche wurde durch einen geänderten funktionalen Zusammenhang zwischen der Dampfkonzentration und der O_3-Zersetzung korrigiert.

Weiter wurde die Sauerstoffkonzentration als neuer Parameter in das O_3-Modell aufgenommen. Jetzt kann ein Sauerstoffmangel, wie er z. B. in einem Containment bei Rekombinatorbetrieb auftreten kann, berücksichtigt werden. Auch lassen sich Experimente mit einem Sauerstoffgehalt, der von dem normaler Luft abweicht, wie z. B. PHEBUS-Versuch FPT1 mit nur 5 Vol.-% O_2, genauer nachrechnen.

2.3.2 Berücksichtigung der radiolytischen Bildung von Salpetersäure

2.3.2.1 Hintergrund

In COCOSYS ist das pH-Wert-Modell von AREVA implementiert /FUN 07, ECK 11/. Eine der erfassten, pH-relevanten Substanzen im Sumpf ist Salpetersäure (HNO_3). Bei einem Reaktorunfall wird HNO_3 sowohl im Sumpf als auch in der Atmosphäre gebildet. Im Sumpf entsteht sie radiolytisch aus den Zersetzungsprodukten des Wassers und dem Stickstoff der gelösten Luft /BEA 92/. In der Atmosphäre werden gasförmige Stickoxide (NOx) durch radiolytische Zersetzung der Luft produziert. Diese reagieren mit Nebeltöpfchen und an Wasseroberflächen der Kondensatfilme auf Strukturen bzw. Sümpfe weiter zu Salpetersäure.

Die im Gasraum gebildete Salpetersäure kann auf zwei Wegen in den Sumpf gelangen:

(1) Durch Massentransfer an der Sumpfoberfläche. Dieser umfasst den Übergang von NOx und von tropfenförmiger HNO_3 von der Atmosphäre in den Sumpf.

(2) Durch Ablagerung von NOx und an Tröpfchen gebundener HNO_3 durch Dampfkondensation am Wasserfilm entlang der Wand. Von dort wird HNO_3 weiter in den Sumpf abgewaschen.

Die HNO_3-Bildung im Sumpf wurde bereits bei der Erstellung des pH-Modells erfasst /ECK 11, WEB 09/. In der vorliegenden Arbeit sind die Modellierung der relevanten Prozesse in der Gasphase und die Implementierung des Modells in COCOSYS beschrieben.

2.3.2.2 Konzept

Die Modellierung des HNO_3-Transports entlang der Wand ist schematisch in Abb. 2.11 dargestellt. Vereinfachend wird angenommen, dass HNO_3 nur im Gasraum gebildet wird. Die Bildungsrate ist wie in /GAU 05/ beschrieben. Tatsächlich wird die Säure auch an den Kondensatoberflächen produziert. HNO3_G, DEP_HNO3 und HNO3 sind die Salpetersäure-Spezies im Gas, an der Wand und im Sumpfwasser. Sie sind in Tab. 2.1 genauer beschrieben.

Die Ablagerung von HNO_3 auf der Wand und der Transport weiter in den Zonensumpf (Drainage) werden durch die folgenden chemischen Gleichungen beschrieben.

$$HNO3_G \xrightarrow{KHNO3_DEP} DEPG_HNO3 \tag{2.6}$$

$$DEPG_HNO3 \xrightarrow{KHNO3_DRA} HNO3 \tag{2.7}$$

Die Reaktionskonstanten KHNO3_DEP und KHNO3_DRA sind die Ablagerungs- und die Drainagegeschwindigkeit (Details. s. unten). Beide Prozesse laufen nur in eine Richtung ab.

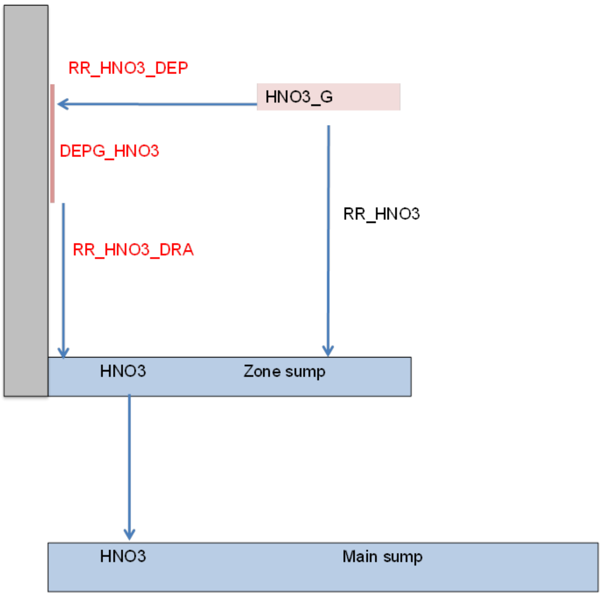


Abb. 2.11 Transport von HNO_3 zwischen Atmosphäre und den Sümpfen (rot: neue Spezies bzw. Reaktionsraten)

Abgelagertes HNO_3 kann also nicht wieder in die Atmosphäre freigesetzt werden und gelöstes HNO_3 kann nicht zurück in die Gasphase gelangen.

Tab. 2.1 HNO_3-Spezies in AIM-3 (rot: neue Spezies)

Name und Phase der Spezies	**Variablenname** [1)]	**Dim.**	**Index-Bezeichnung**	**Molekulargewicht (g/mol)**
HNO3(g) Gasförmige und in Tröpfchen gelöste Salpetersäure	HNO3_G (HNO3)	mol/l	IA%HNO3	63,0
HNO3(dep) Salpetersäure im Wasserfilm	DEPG_HNO3 (HNO3_DEP)	mol/m²	neu	63,0
HNO3(w) Salpetersäure im Sumpf	HNO3 (HNO3)	mol/l	MGZ+IS%HNO3	63,0
[1)] z. B. ZDOT(IA%HNO3) = d HNO3(g) /dt in mol/(l·s)				

2.3.2.3 Kinetische Gleichungen und Reaktionskonstanten

Die kinetischen Gleichungen für die drei Salpetersäure-Spezies sind:

– Atmosphäre

$$d\,HNO3_G\,/dt = +\,k(87) \cdot DR_G \cdot m_{N2}/V_G - KHNO3 \cdot PGF \cdot HNO3_G\,/\,V_G - KHNO3_DEP \cdot HNO3_G \cdot S_{PAINT,G}/V_G \quad (2.8)$$

– Wand

$$d\,DEPG_HNO3\,/dt = KHNO3_DEP \cdot HNO3_G \cdot 1000 - KHNO3_DRA \cdot DEPG_HNO3 \quad (2.9)$$

– Sumpf

$$d\,HNO3\,/dt = +\,k(86) \cdot DR_S + KHNO3_DRA \cdot DEPG_HNO3 \cdot S_{PAINT,G}/V_S \cdot 1000 + KHNO3 \cdot PGF \cdot HNO3_G/V_S \quad (2.10)$$

m_{N2}	Stickstoffmasse (kg)
MG(N2)	Molare Masse von N_2, = 28.01 g/mol
DR_G, DR_S	Dosisleistung im Gas und im Sumpf (kGy/h)
$S_{PAINT,G}$	Farbfläche im Gasraum (m²)
PGF	Sumpfoberfläche (m²)
VG, VS	Volumen des Gasraumes und des Sumpfes (m³)

Alle rot geschriebenen Parameter sind neu oder wurden modifiziert. Alle neuen Werte der Reaktionskonstanten sind in Tab. 2.2 zusammengefasst. Die Werte der HNO_3-Bildungsraten (k87) in der Atmosphäre und im Sumpf (k86) haben sich gegenüber älteren Versionen aus unterschiedlichen Gründen stark geändert. Bei (k87) wurde ein Dimensionsfehler korrigiert. In der Gleichung mit k86 wurden bereits vorhandene Faktoren in die Konstante aufgenommen, ohne dass sich am Ergebnis etwas geändert hat.

Tab. 2.2 Chemische Reaktionen und Reaktionskonstanten (Rot: neue oder geänderte Konstanten)

Chem. Reaktion und physikalischer Prozess		Interne Reaktions-Nr.	Reaktionskonst. / Aktivierungsenergie				
			BAS1	BAS2 (Wand-kond.)	Dimen-sion von BAS1/2	EAKT1 [J/mol]	EAKT2 [J/mol]
HNO_3 Produktion und Transport							
Radiolytische HNO_3 Produktion im Sumpf	Gelöste Luft + γ → HNO_3(w)	K(86)	9,7E-3 2,79E-13	9,7E-3 2,79E-13	1/100 eV mol/(kg·kGy)	0,0	0,0
Radiolytische HNO_3 Produktion im Gas	Air + γ → HNO_3(g)	K(87)	Code: 0,0 5,43E-3 5,45E-10	Code:0,0 5,43E-3 5,45E-10	mol/kGy mol/(kg·kGy)	0,0	0,0
HNO_3(g) Transfer von Gas → Sumpf	HNO_3(g) → HNO_3(w)	KHNO3, (k(89))	1,E-4 1,E-5	1,E-4 1,E-5	m/s		
Nasse HNO_3(g) Ablagerung an Wand (Farb- oder Stahlwand)	HNO_3(g) → HNO_3(dep)	KHNO3_DEP, (k(90))	0,0	Calc,	m/s	0,0	0,0
HNO_3(dep) Abwaschen von Wand →Sumpf	HNO_3(dep) → HNO_3(w)	KNO3_DRA, (k(91))	0,0	2,7E-7	m/s	0,0	4,32E4

2.3.2.4 N_2-Verbrauch und Sauerstoffverarmung

Bei einem Reaktorunfall beträgt der abgeschätzte Verbrauch von N_2 in der Containment-Atmosphäre durch die radiolytische Salpetersäurebildung nur ca. 1 % des N_2-Anfanginventars in 30 Tagen. Er ist vernachlässigbar klein und muss in der N_2-Bilanz nicht berücksichtigt werden.

Das Gleiche würde auch für den Verbrauch von Sauerstoff gelten, wenn dieser nicht bei einem Reaktorunfall durch Rekombinatoren beim Abbau von H_2 stark reduziert bzw. nahezu komplett aufgebraucht werden würde. Durch die etwa 60 in einem DWR-Containment verteilten Rekombinatoren (PAR) wird der gesamte Sauerstoff innerhalb eines Tages nach Unfallbeginn i. d. R. verbraucht und es kommt zu einer O_2-

Verarmung. Typische COCOSYS-Rechnungen zeigen, dass die O_2-Konzentration bereits einen Tag nach Unfallbeginn weniger als 2 Vol.-% betragen kann.

Im Modell wurde daher die Anhängigkeit der HNO_3-Bildung von der Auerstoffkonzentration berücksichtigt. In normaler Luft ist der O_2-Anteil 20,94 Vol.-%. Bei Unterschreiten einer Grenze (hier 2 Vol.-%) wird im Modell die Bildung komplett unterbunden.

$$d\ HNO3_G\ /\ dt = 5{,}45E\text{-}10 \cdot c_{O2} \cdot DR_G \qquad \text{wenn} \quad c_{O2} \geq 2{,}0\ \text{Vol.-\%} \qquad (2.11)$$

$$d\ HNO3_G\ /\ dt = 0 \qquad \text{wenn} \quad c_{O2} < 2{,}0\ \text{Vol.-\%}$$

c_{O2} Sauerstoff-Konzentration (Vol.-%)

2.3.2.5 Massentransfer von HNO_3 direkt in den Sumpf (KHNO3)

Der Massentransfer von „gasförmiger" HNO3_G direkt in den Sumpf erfolgt nach

$$RR(KHNO3) = KHNO3 \cdot PGF \cdot HNO3_G \qquad (2.12)$$

KHNO3 = 1,0E-5 m/s (neu; früher 1,0E-4 m/s)

KHNO3 Massentransferkoeffizient für HNO_3 vom Gas in den Sumpf (m/s)

PGF Sumpfoberfläche (m²)

Es wird angenommen, dass der Massentransferkoeffizient für Stickoxide und tröpfchenförmige Salpetersäure von der Atmosphäre in den Sumpf gleich dem Default-Wert für den wasserseitigen I_2-Massentransferkoeffizienten ist. Der Massentransferkoeffizient wird von 1,0E-4 m/s (aktuell) auf 1,0E-5 m/s reduziert, da nunmehr der Hauptpfad über die Wände separat modelliert ist.

2.3.2.6 Nasse Ablagerung von HNO_3 an der Wand und Abwaschen in den Sumpf (KHNO3_DEP, KHNO3_DRA)

$$RR(KHNO3_DEP) = + KHNO3_DEP \cdot HNO3_G \cdot 1000 \tag{2.13}$$

Die Ablagerung von HNO_3 aus der Gasphase an die Wand erfolgt nur bei Wandkondensation. Die gasförmigen Stickoxide werden zusammen mit dem kondensierenden Dampf in den Wasserfilm transportiert (Stefan Flow) und bilden dort Salpetersäure. Die Geschwindigkeit der Ablagerung wird gleich der Stefan-Geschwindigkeit angenommen. Sie hängt von der Kondensationsrate ab.

$$KHNO3_DEP = v_{Stef} = \frac{\dot{m}_{St}}{\rho_{St} A_{tot}} \tag{2.14}$$

$$A_{tot} = A_F + A_{St} + A_B \tag{2.15}$$

$$EAKT\ (KHNO3_DEP) = 0. \tag{2.16}$$

v_{St}	Stefan-Geschwindigkeit (m/s)
$\dot{m}_{St}$	gesamte Kondensationsrate in der Zone (kg/s)
A_{tot}	gesamte Wandfläche, Summe der Farb-, Stahl- und Beton-Oberflächen (m^2)
ρ_{st}	Dampfdichte (kg/m^3)

Bei typischen Kondensationsraten von 3,0E-5 bis 3,0E-4 kg/(m^2 s) liegt die Ablagerungsgeschwindigkeit zwischen 4,0E-5 und 4,0E-4 m/s.

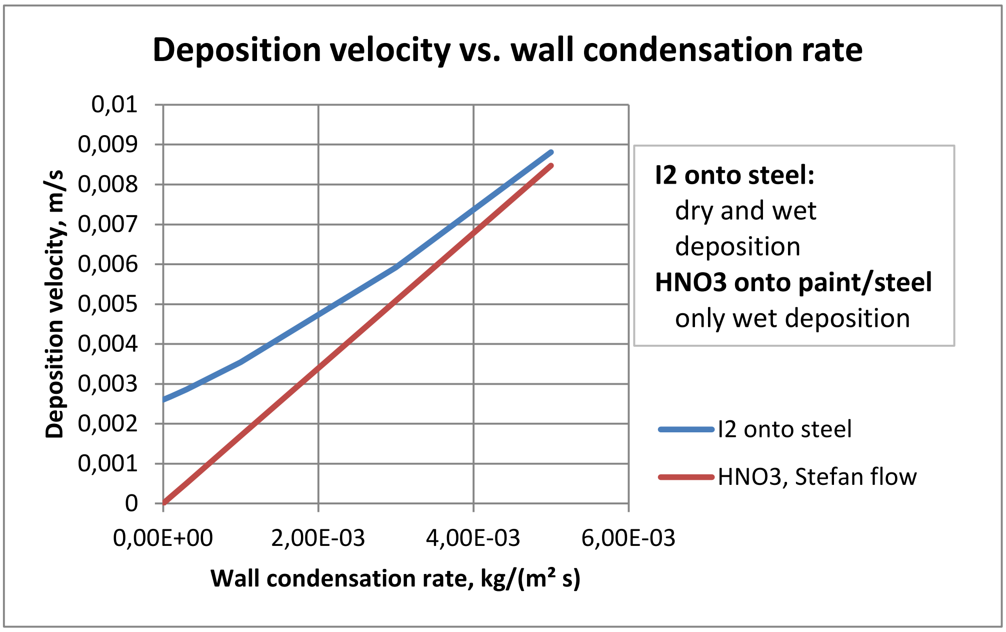


Abb. 2.12 Ablagerungsraten für HNO_3 und I_2 als Funktion der Wandkondensationsrate

KHNO3_DEP wird aus der aktuellen Kondensationsrate und der aktuellen Dampfdichte in Sr. AECALC ähnlich wie die Konstante k(51), die die Ablagerung von I_2 auf Stahl beschreibt, berechnet. KHNO3_DEP unterscheidet sich vor allem bei kleinen Kondensationsraten von k(51), da I_2 auch bei trockenen Bedingungen abgelagert wird (Abb. 2.12).

Nur wenn $\dot{m}_{St}/A$ > ACOND ist, d. h. Wandkondensation vorliegt, wird die Ablagerung von HNO_3 gerechnet. Für $\dot{m}_{St}/A$ ≤ ACOND herrschen definitionsgemäß trockene Bedingungen an den Wänden.

2.3.2.7 Abwaschen von HNO_3 in Sumpf (KHNO3_DRA)

Der Transport des im Wasserfilm abgelagerten HNO_3 erfolgt mit der Drainage des Kondensats zuerst in den Zonensumpf und von dort weiter in den Hauptsumpf. Ist kein Zonensumpf definiert oder liegt der Wasserstand im Sumpf nicht über der kritischen Sumpfhöhe CRTHE, **wird kein HNO_3 abgewaschen**. Diese Unterdrückung des Abwaschens ist unabhängig von der Kondensationsrate.

RR(KHNO3_DRA) = KHNO3_DRA · DEPG_HNO3 (2.17)

Für KHNO3_DRA wird die gleiche Abwaschrate wie für abgelagertes I_2 (k(9)) angenommen (vergl. /WEB 09/). Sie ist von der Temperatur abhängig.

$$KHNO3_DRA = 2.7E\text{-}7 \text{ m/s} \tag{2.18}$$

$$EAKT\ (KHNO3_DRA) = 4.32E{+}4 \text{ kJ/mol} \tag{2.19}$$

Die HNO_3-Abwaschrate ist für alle Arten von Oberflächen (Farbe, Stahl und Beton) gleich. Von den Zonensümpfen kann HNO_3 über Drainageleitungen bis in den Sumpf abgewaschen werden.

2.3.2.8 Schlussfolgerungen

Ein Modell zur radiolytischen Bildung von Salpetersäure in der Gasphase des Containments und ihrem Transport in den Reaktorsumpf wurde erstellt und in COCOSYS-AIM implementiert. Damit kann die Wirkung des im Gasraum produzierten HNO_3 auf den pH des Reaktorsumpfes erfasst werden. Die starke Säure senkt den pH im Sumpf und verstärkt die Freisetzung von flüchtigem Iod aus dem Sumpf. Auch die Unterdrückung der HNO_3-Produktion infolge eines Sauerstoffmangels, wie er beim H_2-Rekombinator-Betrieb eintreten kann, wird berücksichtigt.

2.3.3 Spaltproduktrückhaltung in Ventingstrecken

2.3.3.1 Hintergrund

In deutschen Kernkraftwerken werden unter anderen sogenannte Trockenfilter-Einrichtungen zur Reinigung des Abluftstroms von radioaktiven Aerosolen und Iod während einer kontrollierten Druckentlastung des Containments (Venten) im Verlaufe von Ereignissen mit Kernzerstörung (Reaktorunfälle) eingesetzt. Der Ventingfilter setzt sich aus einem Vor- und einem Feinfilter, beide aus Metallfasern, und einem Iod-Sorptionsfilter zusammen (Abb. 2.13) /WIL 96/. Der gereinigte Gasmassenstrom wird über den Kamin an die Umgebung abgeführt, wobei ins Containment freigesetzte radioaktive Edelgase nicht und Organoiod nur teilweise im Ventigfiltersystem zurückgehalten werden.

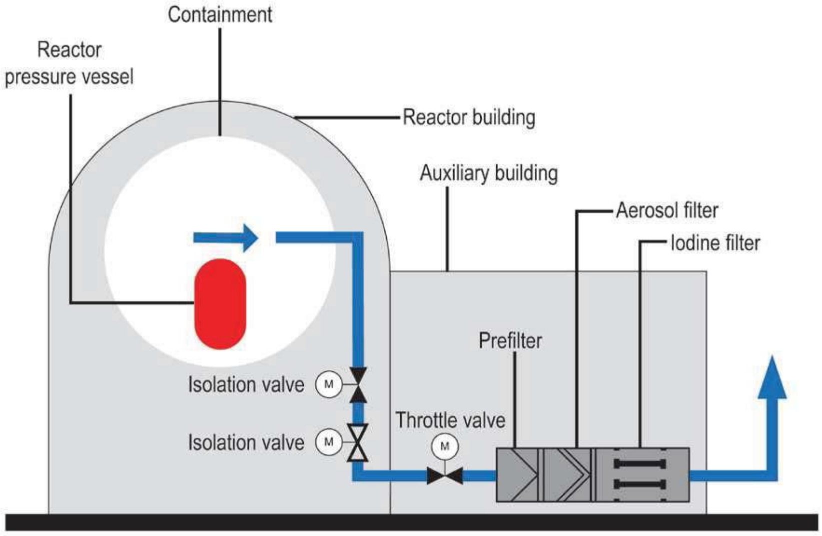


Abb. 2.13 Trockene Venting-Filterstrecke mit einem Aerosolfilter aus Metallfasern und einem Iod-Sorptionsfilter

2.3.3.2 Modell für Metallfaser-Ventingfilter – MMFVF

Für COCOSYS wurde ein Modell für das trockene Filtersystem – **M**odell für **M**etall**f**aser-**V**enting**f**ilter, im Folgenden MMFVF genannt – erstellt. Es berechnet anhand des Inventars an luftgetragenen Spaltprodukten im Containment den radioaktiven Quellterm an die Umgebung. Im Einzelnen werden im MMFVF-Model folgende Prozesse simuliert:

1. Partikelgrößenabhängige Abscheidung jeder Aerosolkomponente in jeder Schicht des Vor- und Feinfilters,
2. Druckverlust des Ventingmassenstroms am leeren sowie aerosolbeladenen Filtersystem bis zur Verstopfung des Filters (Plugging); spontanes Plugging bei zähflüssigem Aerosolmaterial (z. B. hygroskopische Aerosole),
3. Rückhaltung von Iod im Sorptionsfilter und
4. Aufheizung des Filtersystems durch Nachzerfallswärme.

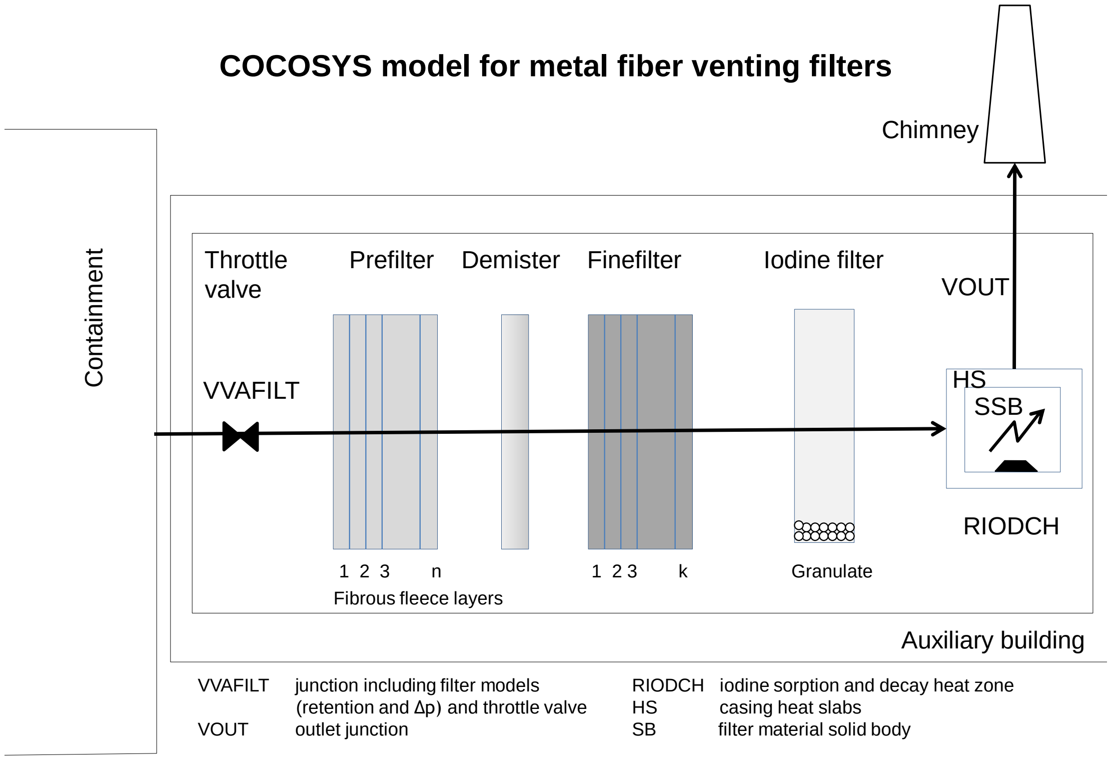


Abb. 2.14 Modell des Metallfaser-Ventingsystems

In Abb. 2.14 sind die einzelnen Komponenten des Filtermodells schematisch dargestellt. Das komplette Modell mit Validierungsrechnungen zu zwei ACE-Versuchen ist ausführlich in einem eigenständigen technischen Bericht für das vorliegende Vorhaben beschrieben /WEB 13/.

Für jeden Filter, der aus einer Vielzahl von Fasern besteht, wird zuerst der Abscheidegrad von Aerosolpartikeln an einer einzelnen Faser berechnet und daraus für die Gesamtheit der Fasern der totale Abscheidegrad (Effizienz) bestimmt. Der Gesamtwirkungsgrad einer Faser setzt sich aus den Einzelwirkungsgraden für die Abscheideprozesse Diffusion, Interception, Impaktion und Gravitationsabscheidung zusammen. Das Faserfiltermodell basiert im Wesentlichen auf Arbeiten von K.W. Lee und B.Y.H. Liu /LEE 82/. In COCOSYS wird der Abscheidegrad für 8 chemisch verschiedene Aerosolkomponenten mit bis zu 20 Partikelgrößenklassen berechnet. Auf einer Komponente wird das luftgetragene Wasser bilanziert.

Für das Ansteigen des Druckverlusts am Filter infolge Beladung wurde ein Modell für trockene Beladung und eines für zähe Flüssigkeiten entwickelt. Die Abhängigkeit des

Druckverlusts von der Beladung mit trockenem Aerosol wird im MMFVF-Modell durch ein Polynom beschrieben.

$$\frac{\Delta p_{Ld}}{\Delta p_0} = (1 + a\, m_{Ae} + b\, m_{Ae}^2) \qquad (2.20)$$

Δp_0, Δp_{Ld} Druckverlust der Strömung am unbeladenen bzw. beladenen Filter (Pa)

m_{Ae} trockene Aerosolmasse am Filter (kg)

a, b Koeffizienten

Bei der Beladung des Filters mit flüssigem bzw. zähflüssigem Aerosolmaterial kann es zu einem Verlagern des Materials im Filter kommen. Dies kann zu einem Verstopfen des Filters führen. Der Druckverlust am Filter steigt dabei stark an. Dieser Prozess, der die Integrität des Filters gefährden kann, wird als spontanes Plugging bezeichnet. Spontanes Plugging wurde auch an einem deutschen Metallfaserfilter im nassen ACE-Versuch AA20 beobachtet (Abb. 2.15) /DIC 90/. Der Aufbau des Filters ist dem der trockenen Filtersysteme in deutschen KKWs sehr ähnlich.

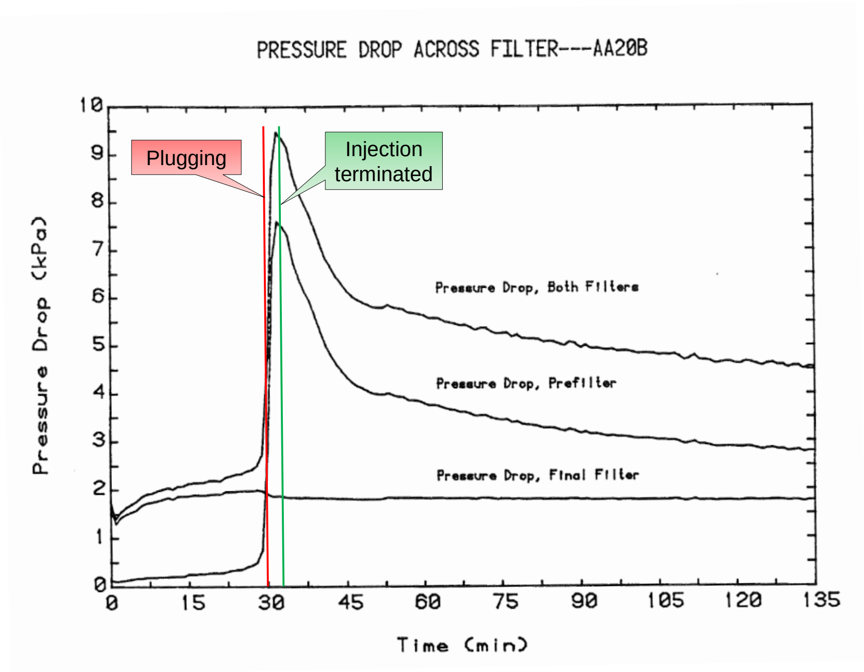


Abb. 2.15 Druckverlust am KfK-Metallfaserfilter im nassen Versuch AA20 /DIC 90/

Im MMFVF-Modell wird der Zusammenhang zwischen der Beladung mit mobilem Aerosolmaterial (Flüssigkeiten) und dem Druckverlust der Gasströmung am Filter durch ein semi-empirisches Modell aus 3 Phasen nach /FRI 05/ beschrieben:

In der **1. Phase** bildet die Flüssigkeit Hüllen um die Fasern. Der Druck in der sogenannten Hüllenbildungsphase steigt etwa linear mit der Gesamtaerosolbelegung.

Die **2. Phase** beginnt mit Überschreiten der kritischen Flüssigkeitsbeladung. In der Folge wird Flüssigkeit von den Fasern in die Kreuzungspunkte der Fasern umgeschichtet (Umschichtungsphase). Der Druckverlust steigt in der Folge sehr schnell an (spontanes Plugging).

In der **3. Phase** bleibt der Druckverlust auch bei weiterer Ablagerung von Flüssigaerosol konstant, da überschüssige Flüssigkeit infolge Schwerkraft aus dem Filter nach unten abläuft (Drainagephase).

Das MMFVF Modell kommt mit einer relativ kleinen Anzahl an Daten aus, die aber für jede Filterschicht (Vlies) zur Verfügung stehen müssen. Es sind im Wesentlichen die effektive Anströmfläche und die Dicke des Vlieses, die Filterflächenmasse der Vliese (kg/m²) sowie der Faserdurchmesser. Allerdings reichen diese Angaben in der Regel nicht aus, die größenabhängige Rückhaltung der Partikel in einem realen Filter hinreichend genau zu beschreiben. Es wurde daher ein Verfahren zur Kalibrierung des MFFVF-Modells entwickelt, bei dem anhand zusätzlicher Messwerte zum Filter (1) die Genauigkeit der berechneten Partikelabscheidung in jeder Filterschicht und (2) die Genauigkeit der Druckverlustrechnung bei Beladung für jede Filterschicht weiter verbessert werden kann. Je mehr Messdaten für Vor- und Feinfilter zur Verfügung stehen, desto genauer werden die Ergebnisse des Modells.

Das Rechenverfahren für die Kalibrierung von Druckverlust und Abscheidegrad ist in /WEB 13/, Appendix A, detailliert beschrieben. Es können sowohl Einzelfilter als auch eine Serie von Filtern unterschiedlichen Aufbaus (Faserdicke, Porosität und Filterdicke) kalibriert werden (Abb. 2.16).

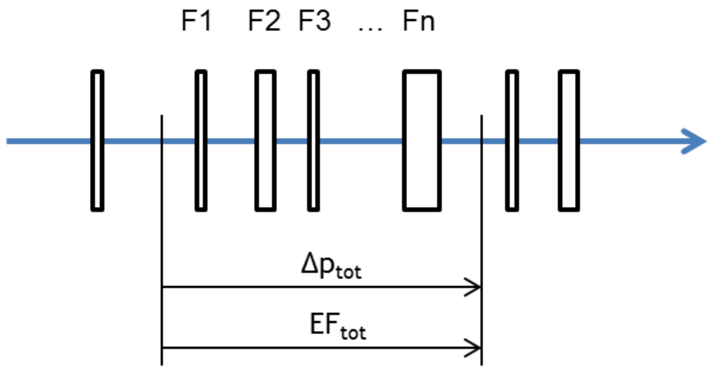


Abb. 2.16 Serie von Filtern für Kalibrierung

Die Rückhaltung von molekularem Iod (I_2) im Iod-Sorptionsfilter ist im MMFVF-Modell auch simuliert, nicht aber die viel geringere Rückhaltung von Organoiod (CH_3I, etc.). Die Ablagerung (Physisorption; k_{ads} bzw. k_{des}) und die Reaktion mit der Ag-dotierten Oberfläche (Chemisorption; k_{chs}) von I_2 im Zeolith-Iodfilter wird nach dem bewährten Zwei-Stufen-Ansatz im Advanced Iodine Model (AIM), das in COCOSYS integriert ist, berechnet:

$$I_2(g) \underset{k_{des}}{\overset{k_{ads}}{\rightleftarrows}} I_2(dep) \qquad \text{(Physisorption)} \tag{2.21}$$

$$I_2(dep) + 2\,Ag \xrightarrow{k_{chs}} 2\,AgI \qquad \text{(Chemisorption)} \tag{2.22}$$

2.3.3.3 Rechnung der ACE-Versuche AA19 und AA20

In der Phase A des internationalen Programms „Advanced Containment Experiments“ (ACE) wurden um 1990 in der CSTF-Anlage in Hanford, USA, verschiedene Ventingfilter-Einrichtungen, wie Sandbettfilter, Faserfilter und unterschiedliche Venturi-Anordnungen unter unfalltypischen Bedingungen getestet. Die zwei Versuche AA19 und AA20 wurden mit 2-stufigen Metallfaserfiltern, die im Kernforschungszentrum Karlsruhe, Laboratorium für Aerosol- und Filtertechnik (LAF)-I entwickelt worden waren, durchgeführt (Abb. 2.17) /DIC 90/.

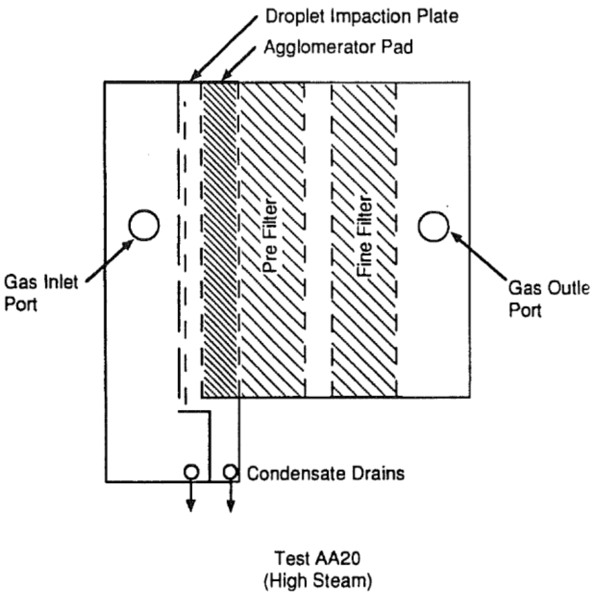


Abb. 2.17 Schematische Darstellung des KfK-Metallfaserfilters für ACE-Tests /DIC 90/

Zur Überprüfung des MMFVF-Modells wurden die beiden Versuche nachgerechnet und interpretiert. Eine detaillierte Beschreibung der COCOSYS-Rechnungen zu den Filtertests mit Nodalisierung, Eingabedaten (Teststand, Filtermaterialdaten, Testbedingungen) und der Kalibrierung des Modells ist in /WEB 13/ enthalten.

Die Abscheidekurve wurde anhand der Messungen, die mit dem Testaerosol Dioctylphthalate (DOP) für AA19 und AA20 durchgeführt worden waren, kalibriert. Die DOP-Partikelgröße liegt mit MMD = 0,7 µm nahe an der berechneten MPPS. In der Schicht 1 des Vorfilters ist die berechnete MPPS = 1,1 µm und in der Schicht 6 ist die MPPS = 0,45 µm. Abb. 2.18 zeigt die Abscheidekurve der 1. und 6. (letzten) Vorfilter-Schicht vor und nach der Kalibrierung. Diese hat sich durch die Kalibrierung in der ersten Schicht ein wenig und in der letzten gar nicht geändert.

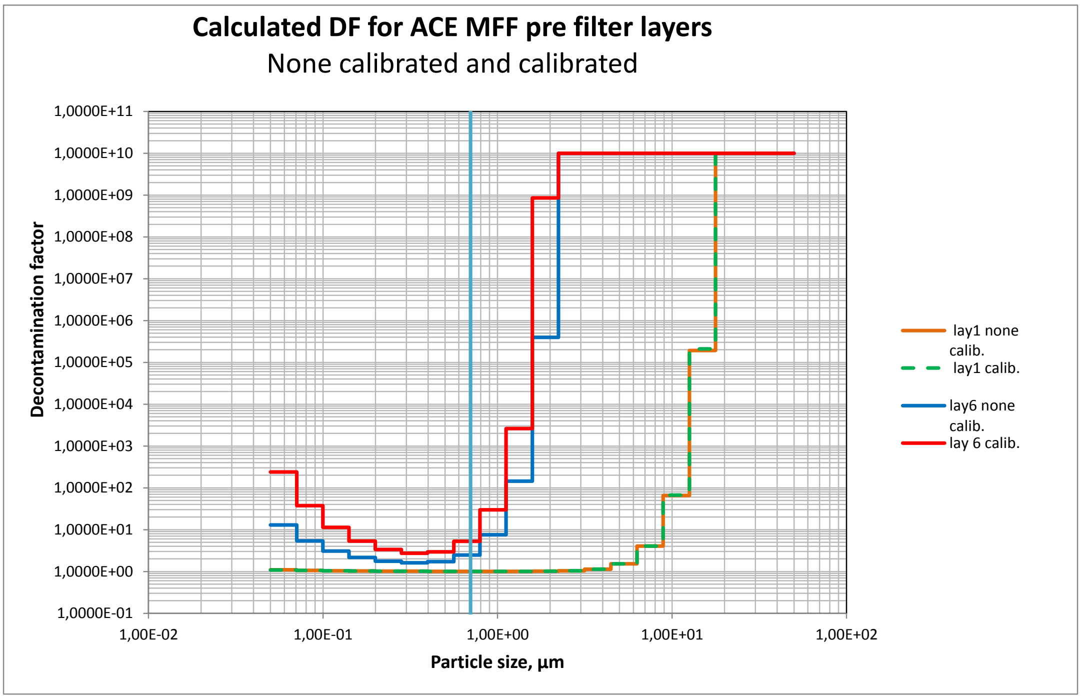


Abb. 2.18 Berechnete DF der Vorfilter-Schichten 1 und 6 vor und nach der Kalibrierung (rot, grün = kalibrierte Werte; hellblau = DOP-Partikelgröße)

Der Filterwiderstand im Modell wird anhand der Druckverlustmessung am leeren Filter kalibriert. Dabei wird die Porosität des Filters angepasst. Da diese auch einen geringen Einfluss auf die Filtereffizienz hat, erfolgt die Kalibrierung des Druckverlusts im COCOSYS-Rechenablauf zuerst.

In der Folge sind einige ausgewählte Ergebnisse der Rechnung zum nassen Versuch AA20 dargestellt. Qualitativ sind die Ergebnisse zum Trockenversuch AA19 ähnlich, doch fehlt die Wasserkomponente und die totale Aerosolabscheidung ist etwas geringer.

Die Größenverteilung des Testaerosols in AA20, bestehend aus dem unlöslichen Mn-, Cs- und Wassertröpfchen, vor dem Filter ist in Abb. 2.18 zum Zeitpunkt t = 20 min dargestellt. Abb. 2.20 zeigt die Größenverteilung zum gleichen Zeitpunkt nach dem Filter. Die Wassermasse im Aerosol ist etwa 3 Mal so groß wie die Cs- und Mn-Massen zusammen. Durch das Anwachsen der ursprünglich trockenen Partikel hat sich der mittlere Durchmesser der Partikel leicht nach oben verschoben.

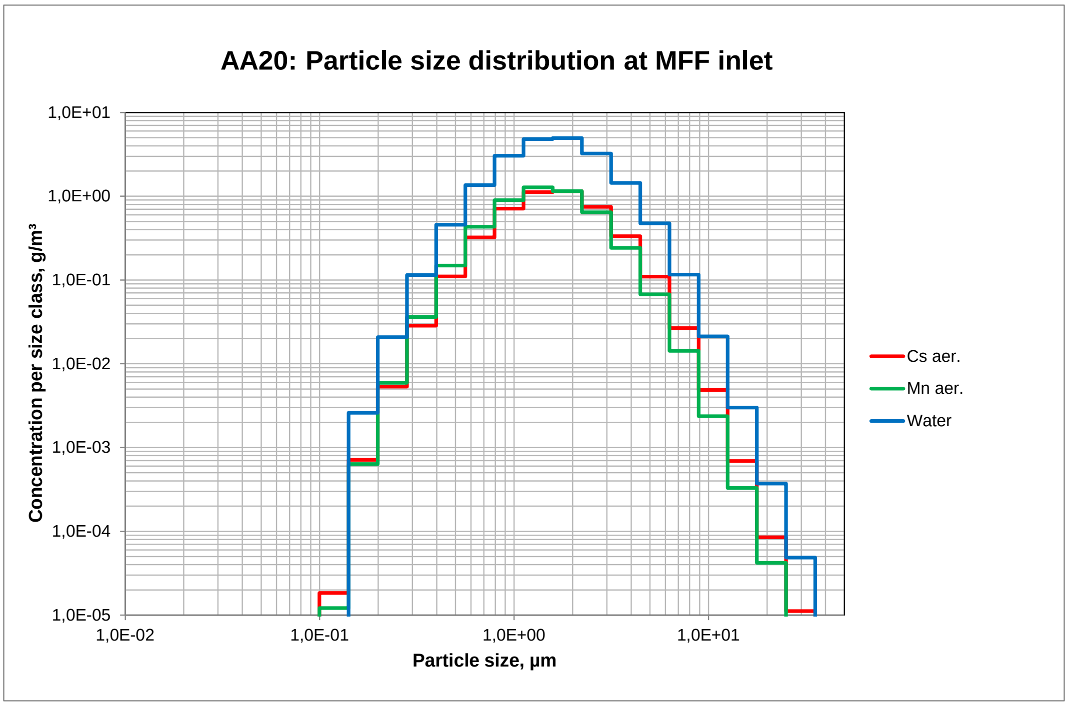


Abb. 2.19 AA20: Größenverteilung der Aerosolpartikel mit Wasseranteil vor dem MFF (t = 20 min)

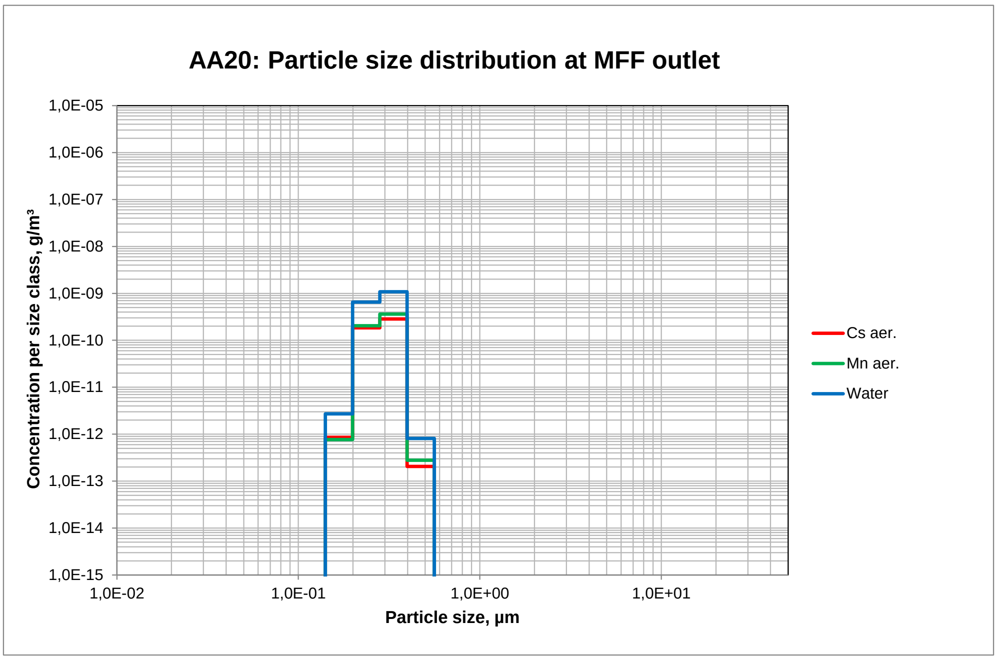


Abb. 2.20 AA20: Größenverteilung der Aerosolpartikel mit Wasseranteil nach dem MFF (t = 20 min)

Die Aerosolkonzentrationen nach dem Filter sind extrem niedrig und die mittlere Partikelgröße liegt bei nur ca. 0,3 µm, d. h. nur sehr kleine Partikel können den MFF passieren. Die berechneten Partikelabscheidekurven in Abb. 2.18 erklären die selektive

Durchlässigkeit. Die Cs/Mn-Zusammensetzung und der Wasseranteil ändern sich bei der Filtration kaum. D. h., die Zusammensetzung der Komponenten ist unabhängig von der Partikelgröße und das Kondensat ist gleichmäßig auf alle Partikel verteilt.

In Abb. 2.21 ist die Verteilung der abgelagerten Cs- und Mn-Aerosolkomponenten und des Wassers am Demister und in den Filterschichten wiedergegeben (Abb. 2.21). Am Demister (DM) wird nur sehr wenig Wasser abgeschieden, da die Tröpfchen klein sind. Das meiste Wasser wird zusammen mit dem Aerosol in der Schicht Nr. 5 abgelagert. Das Plugging derselben Schicht bei 29 min (Details s. unten) hat in der Rechnung keine Auswirkung auf die Aerosolverteilung, da angenommen wird, dass sich die Umverteilung der zähflüssigen Beladung nur auf eine Filterschicht beschränkt.

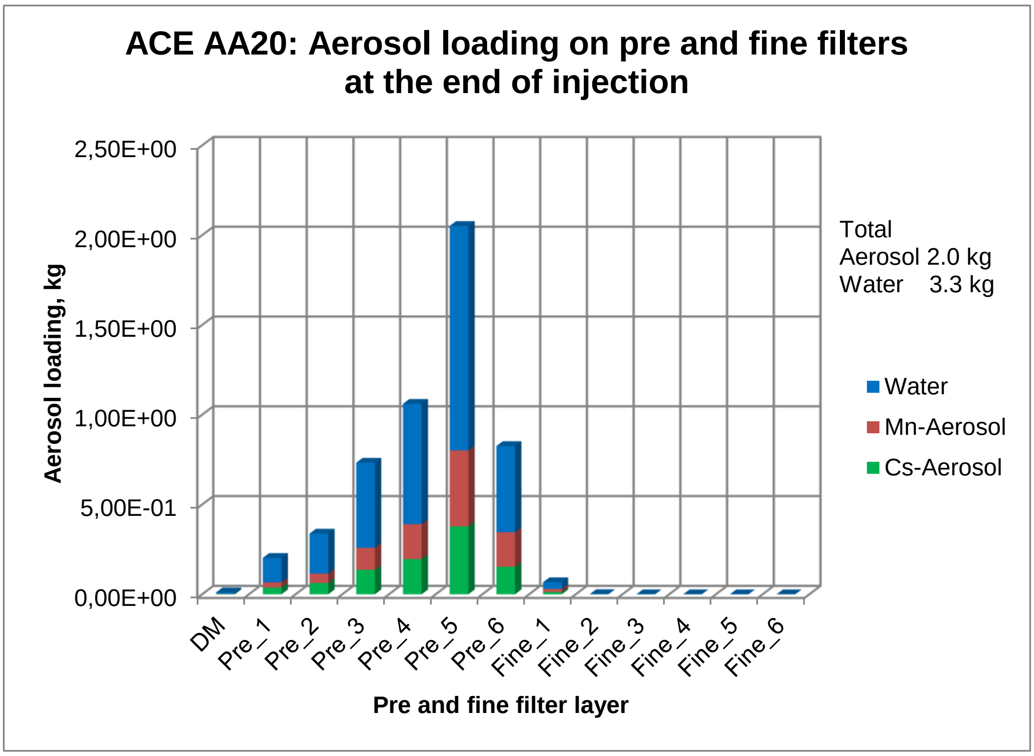


Abb. 2.21 AA20: Berechnete Beladung des Vor- und Feinfilters mit Aerosolen und Wasser

Die gemessenen totalen Dekontaminationsfaktoren (DF) sind in beiden Versuchen für die Cs- und Mn-Komponente fast immer größer als 1,0E+06. Meistens konnte nach dem Filter kein Aerosol gemessen werden und die Konzentration in der Abluft wurde aus der Nachweisgrenze der Messtechnik bestimmt. Die gemessenen und gerechneten Werte sind in Tab. 2.3 zusammengefasst. Im Test AA19 lag nach dem Filter nur die Cs-Aerosol-Konzentration unter der Nachweisgrenze. Die Übereinstimmung zwischen

Rechnung und Messung ist für beide Aerosolkomponenten sehr gut. In AA20 konnten weder Mn noch Cs in der Abluft des Filters nachgewiesen werden. Die gemessenen DF stellen daher nur Untergrenzen dar. Die Rechenergebnisse sind damit konsistent.

Nach den aktuellen Anforderungen der RSK für Ventingfilter-Systeme (DWR und SWR) muss der Abscheidegrad für Aerosole 99,9 % betragen. Das entspricht einem DF = 1000. Die in den ACE-Versuchen gemessenen und die gerechneten DF liegen weit über den Mindestanforderungen. In den RSK-Anforderungen wird nicht zwischen löslichen und unlöslichen Aerosolen unterschieden.

Tab. 2.3 ACE-Versuche: Gemessene und gerechnete totale Dekontaminationsfaktoren der Metallfaser-Ventingfilter

Versuch	Aerosol	DF gemessen	DF gerechnet
AA19	Mn, unlöslich	8,2E+05	3,3E+06
	Cs, löslich	> 3,7E+06 (Nachweisgrenze)	1,5E+08
AA20	Mn	> 2,6E+06 (Nachweisgrenze)	ca. 1,1E+09
	Cs	> 2,1E+06 (Nachweisgrenze)	ca. 1,2E+09

Der gemessene und gerechnete Druckverlust im Test AA20 mit dem plötzlichen Anstieg durch spontanes Plugging am Vorfilter nach ca. 29 min ist in Abb. 2.22 dargestellt. Man erkennt, dass nur die Schicht Nr. 5 verstopft. Dort sind etwa 30 % des gesamten abgelagerten Aerosols. Nur der bewegliche Flüssigkeitsanteil von ca. 60 % führt zum Plugging. Der Druckverlust in der Schicht Nr. 5 nimmt um einen Faktor 83,0 spontan zu. Dieser Faktor wurde durch Anpassung der empirischen Plugging-Korrelation an die AA20-Messwerte ermittelt.

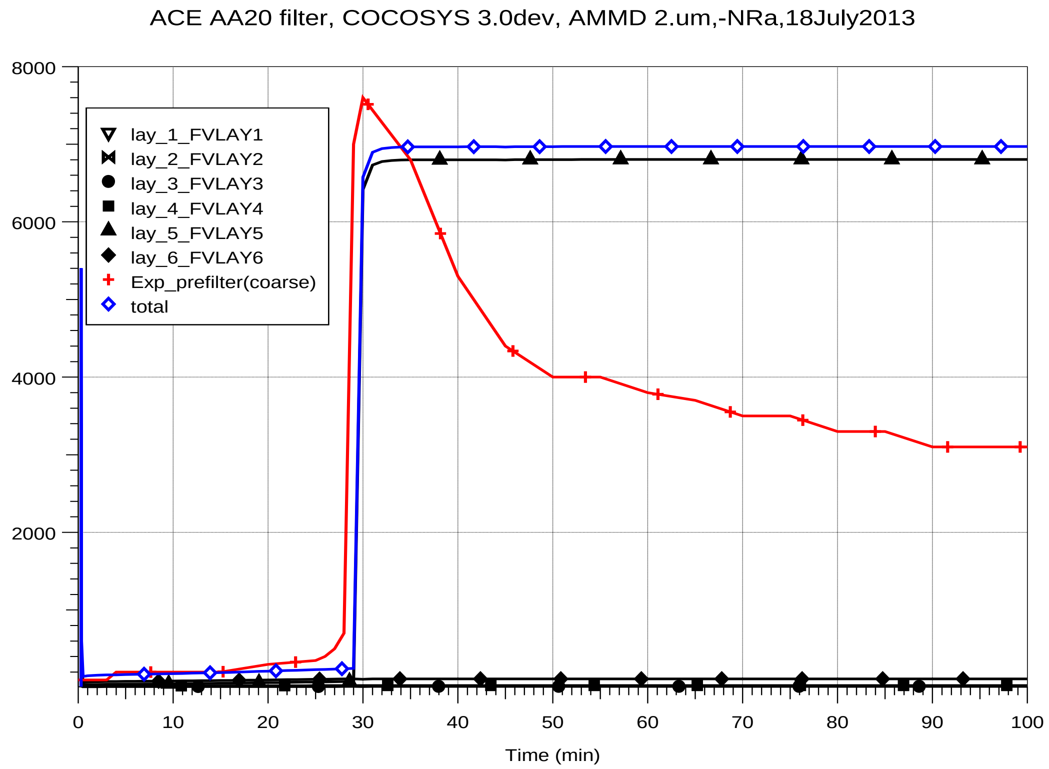


Abb. 2.22 Test AA20: Gemessener und gerechneter Druckverlust am Filter; bei t = 28 min tritt spontanes Plugging auf

2.3.3.4 Schlussfolgerungen

Das neue Metallfaser-Ventingfilter-Modell (MMFVF) in COCOSYS simuliert alle relevanten Abscheideprozesse und den Druckverlust am Filtersystem unter LWR Unfallbedingungen. Es wurde erfolgreich an zwei Versuchen mit deutschen Ventingfiltern der amerikanischen ACE-A Filterserie getestet. Insbesondere konnte die gemessene, sehr gute Aerosolabscheidung des Metallfaserfilters, die weit über die RSK-Anforderung für Ventingfilter-Systeme hinausgeht, analytisch nachvollzogen werden. Das neue Modell ermöglicht ein verbessertes Verständnis relevanter Prozesse, wie die hocheffiziente Partikelrückhaltung, die lokale Beladung von Tiefbettfiltern, das Verhalten hygroskopischer Aerosole und das Verstopfen der Filter. Anhand von neuen Messdaten kann das Modell weiter verfeinert werden.

2.3.4 Modellierung des Einflusses von Feuchte auf die Ablagerung von Iod auf Farbe

Für eine verbesserte Modellierung der Iod-Farbe-Wechselwirkung im COCOSYS-Iodmodell AIM aufgrund der Reaktion einzelner Farbbestandteile ist eine Aufbereitung der experimentellen OECD-BIP2-Daten erforderlich, die erst für das Folgevorhaben BIP3 anvisiert ist. Aus diesem Grund wurde ein Teil der geplanten Verbesserungen verschoben. Die Zurückstellung betrifft nicht den Einfluss der Feuchte auf das I_2-Farbe-Verhalten, zu welchem auswertbare Daten aus dem BIP1- und THAI-Iod-Versuchen vorliegen.

2.3.4.1 Hintergrund

Aktuelle Experimente im Rahmen des OECD-BIP-Programms (Behaviour of Iodine Programm) und im THAI-Programm haben gezeigt, dass der Einfluss der Feuchte auf die Iod Ablagerung auf Farboberflächen deutlich ist (siehe Abb. 2.23): Demnach steigt die Ablagerungsrate mit zunehmender Feuchte. Im OECD-BIP Programm wurden dazu Laborversuche durchgeführt, bei denen das Ablagerungs- und Resuspensionsverhalten von gasförmigem molekularem Iod (I_2(g)) auf mit Amerlock und Ripolin beschichteten Coupon-Farboberflächen untersucht wurde. Auch im THAI-Versuch Iod-27a, der unter extrem trockenen Bedingungen (relative Feuchte (rF) < 1 %) gefahren wurde, wurde eine sehr niedrige I_2-Ablagerung auf Farbe gemessen. Die gesamte Iod-Ablagerung war niedriger als auf dem Behälterstahl. In den BIP- und THAI-Versuchen ist der Einfluss eines geringen Dampfgehalts bis etwa 60 % rF nachweisbar. Relative Feuchten < 60 % sind im Reaktorfall temporär und/oder lokal durchaus zu erwarten. Die Modellierung des Feuchte-Effekts auf die I_2-Ablagerung auf Farbe ist daher auch für Reaktorrechnungen von Bedeutung.

2.3.4.2 Herangezogene Experimente

Für die BIP-Experimente G-5, G-6, G-14 und G-16 ist in Abb. 2.23 die auf den Coupons abgelagerte Iod Masse über der Zeit dargestellt. Der Versuchsablauf bei diesen Versuchen erfolgt in drei Phasen. In jeder Phase wird die Feuchte erhöht (15 %, 40 %, 60 %), dabei bleibt die Iod Beladung in der Gasphase (1,0E-08 mol/l) über die Zeit konstant. Zwischen den drei Phasen gibt es jeweils eine Wartephase von (ca. 2 h), in der die neuen thermohydraulischen Bedingungen eingestellt werden. Die Iod Beladung

auf den Coupons wird mit einem Szintillationsdetektor gemessen. Die vier Versuche unterscheiden sich dadurch, dass jeweils zwei Versuche mit der Farbe Amerlock und die anderen zwei Versuche mit der Farbe Ripolin durchgeführt wurden. Die jeweils zwei Experimente mit einer Farbe wurden dann bei unterschiedlichen Temperaturen (50 °C und 70 °C) realisiert.

In Abb. 2.23 wird gezeigt, dass, je höher die Temperatur und je höher die relative Feuchte ist, desto schneller Iod auf den Farboberflächen abgelagert wird. Die Auswertung der vier Experimente G-5, G-6, G-14 und G-16 zeigt weiter, dass mehr Iod auf der Farbe Amerlock abgelagert wird als auf der Farbe Ripolin. Daraus lässt sich ableiten, dass das Ablagerungsverhalten von Iod auf der Farbe auch vom Fabrikat bestimmt wird. In deutschen Reaktoren wird eine andere Farbe (Gehopon) als die in BIP untersuchten Farben verwendet. Alle diese Farben basieren auf Epoxy-Harz und zeigen daher qualitativ ein ähnliches Verhalten.

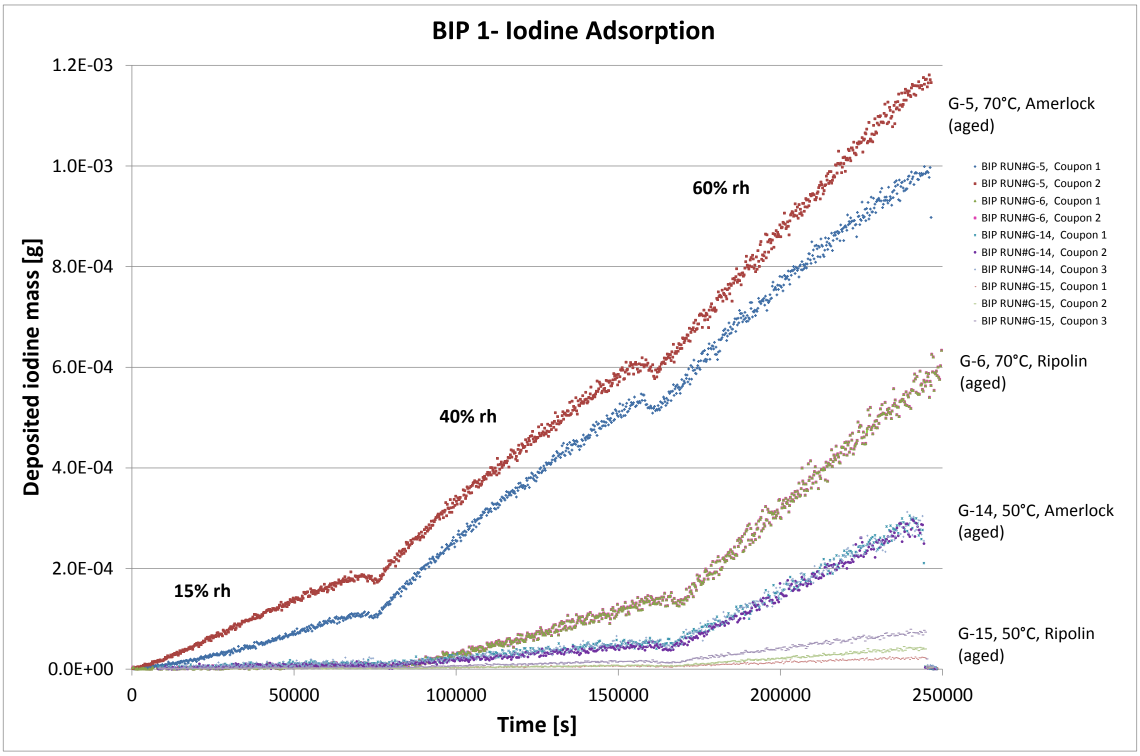


Abb. 2.23 BIP-Tests zur I2-Ablagerung auf Amerlock- und Ripolin-Farbe bei unterschiedlicher Feuchte

Aus diesem Grund werden für die Untersuchung des Feuchteeinflusses auch die THAI Experimente Iod-15, Iod-17, Iod-20, Iod-27a und Iod-28 herangezogen. Der THAI Versuchsbehälter hat ein Volumen von 60 m^3, für die Experimente wurden gestrichene Farboberflächen in dem THAI-Behälter positioniert. Für die genannten wurde eine Far-

boberfläche von jeweils 10 m^3 (THAI Iod 15: 20 m^3) in den Behälter eingebracht. In Tab. 2.4 sind die Temperaturen und relativen Feuchten der Versuche zusammengefasst.

Tab. 2.4 THAI-Experimente mit I_2-Ablagerung und unterschiedlichen Feuchten

THAI Experiment	Phase: Zeit (h)	Relative Feuchte (%)	Temperatur (°C)
Iod-15		43	102
Iod-17	**1:** 0 – 4,50	66	76
	2: 8,70 – 30,50	18	120
Iod-20	**1:** 0 – 2,98	73	100
	2: 10 – 33,25	31	130
Iod-27a		1	40
Iod-28		50	85

Eine Auswertung der einzelnen THAI Iod-Versuche zeigt, dass auch hier die relative Feuchte einen Einfluss auf die Chemisorption von Iod auf Farbe hat. Die Auswertung ist aber schwieriger, da die I_2-Ablagerung auf den 10 bis 20 m² großen Farbflächen aus der Abnahme von der gasförmigen I_2-Konzentration bestimmt werden muss. I_2(g) hängt auch von der Temperatur und der Reaktion mit dem Behälterstahl, dessen Fläche ca. 10 mal so groß wie die Farbfläche ist, ab.

2.3.4.3 Modell

In AIM-3 wird die Ablagerung von Iod an Farboberflächen wie folgt modelliert /WEB09b/:

$$I_2\,(g) \underset{k(62)}{\overset{k(4)}{\rightleftarrows}} I_2\,(dep,p,g) \qquad \text{(Physisorption)} \qquad (2.23)$$

$$I_2\,(dep,p,g) \underset{k(77)}{\overset{k(76)}{\rightleftarrows}} I_{chs}\,(dep,p,g) \qquad \text{(Chemisorption)} \qquad (2.24)$$

I_2 (g) Konzentration von gasförmigem molekularem Iod (mol/l)

I_2 (dep,p,g) Konzentration von auf Farboberflächen physisorbiertem Iod (mol/m^2)

I_{chs} (dep,p,g) Konzentration von auf Farboberflächen chemisorbiertem Iod (mol/m^2)

Analog zum Iod/Stahl Modell in AIM-3 soll auch im Iod/Farbe Modell eine Abhängigkeit der Chemisorption von der relativen Luftfeuchte beschrieben werden. Dazu wird genau wie beim Iod/Stahl-Modell eine dimensionslose Funktion FSAT eingeführt. Die kinetischen Gleichungen für die Reaktionsraten von I_2 (g), I_2 (dep,p,g) und I_{chs} (dep,p,g) sind dann unter Vernachlässigung von k(77):

$$\frac{dI_2(g)}{dt} = -k(4)\frac{S_{\text{paint,g}}}{V_g} I_2(g) + k(62)\frac{S_{\text{paint,g}}}{1000\,V_g} I_2(\text{dep}, p, g) \tag{2.25}$$

$$\frac{dI_2(\text{dep}, p, g)}{dt} = +k(4)\cdot 1000 \cdot\ I_2(g) - \left(k(62) + k(76)\ \ FSAT\right)\ I_2(\text{dep}, p, g) \tag{2.26}$$

$$\frac{dI_{chs}(\text{dep}, p, g)}{dt} = +k(76)\ \ FSAT\ \ I_2(\text{dep}, p, g) \tag{2.27}$$

k(76) Chemisorptionsrate von abgelagertem I_2 mit Farbe

V_g Volumen der Gasphase (m$_3$)

$S_{\text{paint,g}}$ Farboberfläche (m^2)

Die dritte Differentialgleichung stellt im Wesentlichen die Iodsenke durch Chemisorption dar.

Eine Auswertung der experimentellen BIP-Daten in Bezug auf den Einfluss der relativen Feuchte (rF) hat die vorläufige FSAT-Funktion ergeben.

$$FSAT = 2.0 \cdot 10^{-6}\ \cdot\ e^{0.04 \cdot rF\%} \tag{2.28}$$

Mit dieser Funktion werden in der COCOSYS-Nachrechnung die Versuchsergebnisse von BIP-G-5 zur Ablagerung von I_2 auf Farbe besser beschrieben (siehe Abb. 2.24). Für die Nachrechnung von BIP1-G-5 mit der Farbe Amerlock ist die Ablagerungsgeschwindigkeit k(4) angepasst worden (Default-Wert: k(4) = 4,0E-03 m/s, hier:

k(4) = 3,0E-03 m/s), da das in AIM-3 enthaltene Modell nicht für dieses Fabrikat entwickelt wurde.

Dieses Ergebnis zeigt allgemein, dass mit der Berücksichtigung des Feuchteeinflusses mit dem hier skizzierten empirischen Ansatz die Iodablagerung qualitativ besser bestimmt wird.

Die Ergebnisse lassen sich nicht direkt auf deutsche Reaktoren übertragen, da die Oberflächen in den Containments mit der Epoxy-Farbe Gehopon beschichtet sind. U. a. lassen die unterschiedlichen BIP-Ergebnisse für die Farben Amerlock und Ripolin (Abb. 2.24) dies vermuten.

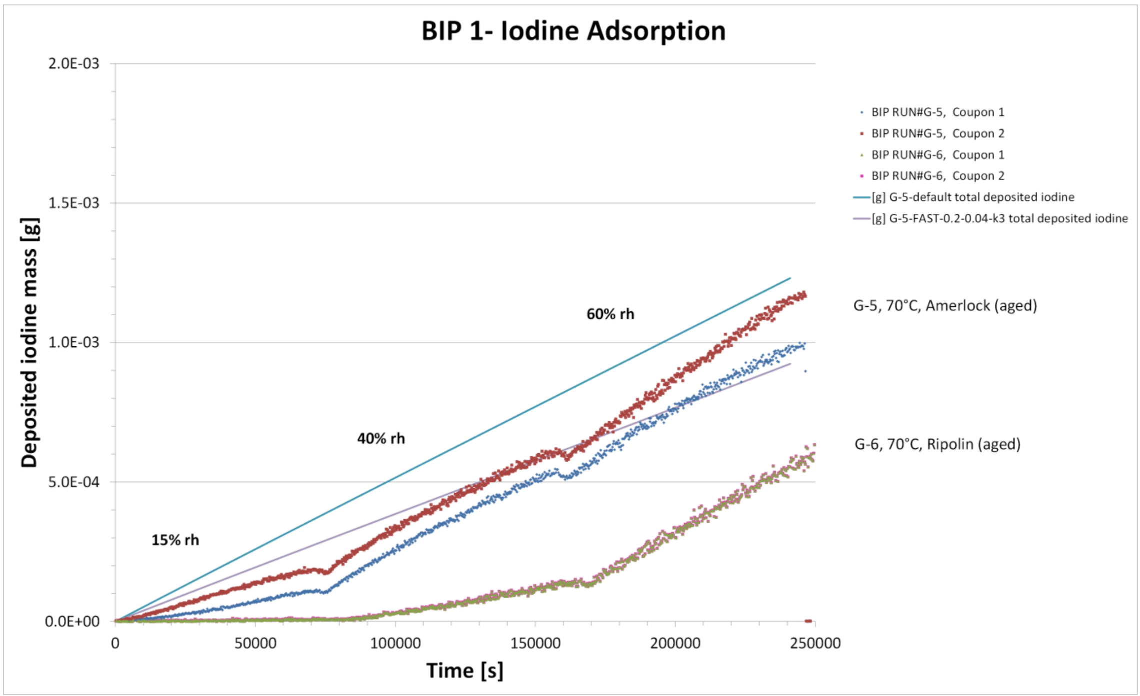


Abb. 2.24 Rechnung des BIP-Tests G-5 (Amerlock-Farbe) mit COCOSYS-AIM und neuer Feuchte-Funktion

2.3.4.4 Schlussfolgerungen

Die anhand eines OECD-BIP-Versuchs ermittelte Feuchte-Funktion für die Chemisorption von I_2 an einer Epoxy-Farbe erlaubt eine bessere Nachrechnung des Versuches mit dem zwei-stufigen Ablagerungsmodell aus AIM. In einem nächsten Schritt muss das neue Modell auch auf andere BIP-Versuche und schließlich auf die viel komplexeren THAI-Versuche angewendet werden. Dabei ist auch die Temperaturabhängigkeit

der Iodablagerung zu berücksichtigen und ggf. zu überarbeiten. Das neu entwickelte und validierte Teilmodell soll schließlich in die Anwenderversion von AIM übernommen werden.

2.3.5 Abwaschen von Aerosolen und Iod von Wandflächen

2.3.5.1 Hintergrund

Bei einem Reaktorunfall wird ein Großteil der in die Containment-Atmosphäre freigesetzten aerosolförmigen- und flüchtig-reaktiven Spaltprodukte durch natürliche Prozesse auf Boden- und Wandflächen abgelagert. Dort, wo Dampf an Wänden kondensiert, werden abgelagerte Spaltprodukte von der Oberfläche abgewaschen und mit dem ablaufenden Kondensat z. B. in den Gebäudesumpf transportiert. Der Abwaschprozess bestimmt die Verteilung der Spaltprodukte (SP) zwischen den Strukturen und der Wasserphase und damit die SP-Konzentrationen in den Pools und im Sumpf, die chemisch-radiolytischen Reaktionen dort, die lokale Freisetzung von Nachzerfallswärme und auch die Sumpftemperatur. Die Effizienz beim Abwaschen ist für unlösliche Aerosole und lösliche Aerosole sowie für Iod unterschiedlich. Eine differenzierte Beschreibung des Abwaschens ist daher eine wesentliche Voraussetzung für eine genaue Simulation des Aerosol- und Iodquellterms aus der Anlage. Generell ist zu unterscheiden zwischen den Aerosol-Prozessen für:

- **Lösliche Aerosole**: dazu gehören vor allem die Spezies CsI, CsOH und Cs_2MoO_4. Sie lösen sich schnell im Kondensat auf und werden in der Regel gut abgewaschen.

- **Unlösliche Aerosole:** die Partikel sind durch Schwer- und Kohäsionskräfte an die Containment-Oberfläche gebunden. Sie werden nur abgewaschen, wenn die hydrostatischen Kräfte des ablaufenden Kondensats stärker als die Haftkräfte sind.

- **Flüchtiges Iod:** vor allem molekulares Iod (I_2) wird bei Wandkondensation im Wasserfilm an der Wand gelöst, reagiert mit Stoffen im Wasserfilm und der Farbe. Die mobilen Iodspezies werden abgewaschen.

Derzeit kann in COCOSYS das Abwaschen nur vereinfacht gerechnet werden. Wesentliche Parameter können nicht berücksichtigt werden, wie die Ablaufgeschwindigkeit und -form des Kondensats, Neigung der Oberfläche, Größe der Partikel, chemische

Reaktionen im Wasserfilm etc. Vor allem sind die Modelle für die drei Abwaschprozesse nicht aufeinander abgestimmt. Z. B. wird das Ausbilden und Ablaufen ein und desselben Wasserfilms in den Modellen unterschiedlich behandelt. Aus diesen Gründen wurde ein Modell entwickelt, das die einzelnen Abwaschprozesse im erforderlichen Detaillierungsgrad beschreibt, aber auch eine geschlossene Darstellung der thermohydraulischen Vorgänge um den Wasserfilm ermöglicht. Die Grundlagen des neuen Modells, das ist das **A**bwaschmodell für **u**n**l**ösliche **A**erosole (AULA) und das I_2-Filmmodell, sind in /SPE 12, WEB 11/ beschreiben.

2.3.5.2 Unlösliche Aerosole

Unlösliche, abgelagerte Aerosolpartikel erodieren und werden mit dem ablaufenden Kondensat dann abgewaschen, wenn die Sohlschubspannungsgeschwindigkeit u_* direkt über den Partikeln einen kritischen Wert $u_{*,c}$ übersteigt. In diese kritische Sohlschubspannungsgeschwindigkeit gehen im Wesentlichen nur Partikelgrößen (Partikeldurchmesser, Dichte) ein. $u_{*,c}$ wird anhand der Shields-Gleichung berechnet und ist für alle Oberflächen und Strömungsformen gleich.

Die Sohlschubspannungsgeschwindigkeit hängt unter anderem davon ab, ob es sich um eine laminare oder turbulente Strömung handelt und ob die Strömung hydraulisch glatt oder rau ist. u_* wird in mehreren Schritten aus der mittleren Ablaufgeschwindigkeit *u* des Wasserfilms bzw. Rinnsals bestimmt.

Welche der beiden Strömungsformen *Wasserfilm* und *Rinnsal,* sich an einer Oberfläche ausbildet, hängt von der Kondensationsrate, der Länge, Neigung und Oberflächenbeschaffenheit der Wandflächen ab und muss empirisch festgelegt werden (z. B. anhand von THAI-Versuchen). Generell ist das Ausbilden von Wandfilmen nur bei höheren Kondensationsraten möglich. Für die jeweilige Strömungsform wird dann *u* berechnet. Für die schmalen Rinnsale ist diese deutlich höher als für die großflächigen Wasserfilme. Daher haben die Rinnsale lokal eine höhere Abwascheffizienz.

Aus u_* und $u_{*,c}$ wird schließlich die Massenerosionsrate des Rinnsals/Films für jede Wandfläche individuell bestimmt

$$k_E = k_{E,0} \frac{(u_*^2 - u_{*,c}^2)}{u_{*,c}^2} \quad \textit{für} \quad u_* > u_{*,c}\text{ , sonst } k_E = 0 \qquad (2.29)$$

$k_{E,0}$ Erosionskonstante (1/s)

Neben der Schwerkraft werden auch Kohäsion- und Adhäsionskräfte berücksichtigt, die die kleinen Aerosolpartikel an die Oberfläche binden. Die Erosionskonstante $k_{E,0}$ ist die Erosionsrate bei dem $\sqrt{2}$–fachen der kritischen Sohlschubspannungsgeschwindigkeit. Für reaktorrelevante Bedingungen muss sie einmal aus Experimenten gewonnen werden, ist aber unter ähnlichen Bedingungen gleich.

In AULA wird in jedem Zeitschritt die Erosionsrate der abgelagerten Aerosole in Abhängigkeit der mittleren Partikelgröße und der Strömungsgeschwindigkeit des ablaufenden Kondensats berechnet. Diese Rate muss für Boden- und Wandfläche separat ermittelt werden, da z. B. die Ablaufgeschwindigkeiten unterschiedlich sind. Für jeden Aerosolzeitschritt wird dann die Konzentration des suspendierten unlöslichen Aerosols im ablaufenden Kondensat bestimmt und durch Integration (Routine AFEBE) die aktuelle Menge des abgelagerten unlöslichen Aerosols berechnet.

Die Zeitableitung für die Konzentration des abgelagerten Aerosols (kg/s) lautet

$$\frac{dc_{Ae,dep}}{dt} = -k_E \, c_{Ae,dep} + Q \qquad (2.30)$$

k_E Erosionsrate

k_{sed} Sedimentationsgeschwindigkeit (m/s)

Q Quellen infolge Aerosolabbau (Sedimentation, etc.) (kg/m²)

Bei Becker Technologies wurden Laborversuche zum Abwaschen eines unlöslichen Silber-Aerosols durchgeführt /LAU 14/. Das Aerosol wurde auf eine farbbeschichtete, geneigte Fläche aufgetragen, die anschließend über einen speziellen Verteiler mit Wasser beaufschlagt wurde. Das mit dem Kondensat abgewaschene Ag-Aerosol wurde gemessen. In 15 Versuchen wurden die Partikelgröße, die Neigung und das Oberflächenmaterial der Platte sowie der Wasserstrom variiert.

Die Ergebnisse zeigen in der Regel am Anfang des Abwaschens die höchste Erosionsrate, die dann in eine kleine, langsam abnehmende, lange anhaltende Erosionsrate übergeht. Als Beispiel sind in Abb. 2.25 die Messergebnisse aus Test 4 wiedergegeben. Insgesamt war die Platte mit ca. 7,5 g Ag-Aerosol, das nicht ganz homogen verteilt war, beladen. Der MMD des Aerosols lag um 2 µm. Die Neigung der Platte betrug 20° und der Kondensatstrom lag bei 11 g/s. Es bildeten sich ca. 10 Rinnsale aus, die weitgehend stabil blieben (Abb. 2.25, rechts) und etwa 45 % der gesamten Fläche bedecken. Von der kondensatüberströmten Fläche wurden in den ersten 130 s 23,2 %

und in 15 min 36,8 % abgewaschen. Von der gesamten Fläche waren es dagegen nur 16,5 % der Beladung.

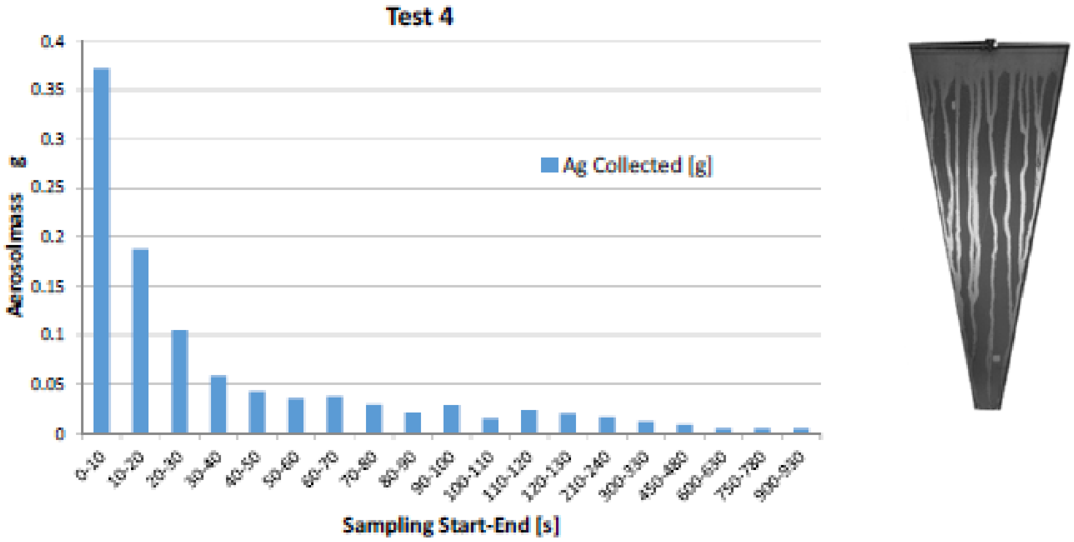


Abb. 2.25 Test 4: Silbermasse in den Kondensatproben; die Sammelzeit war anfänglich 10 s, später 30 s; Rechts: Platte mit Rinnsalen /LAU 14/

Mit AULA kann der Erosionsprozess in den wasserüberströmten Bereichen simuliert werden. Da AULA noch nicht in COCOSYS implementiert ist, wurde stattdessen eine EXCEL-Rechnung durchgeführt, die kleine Unsicherheiten enthält. Die Anzahl und Breite der Rinnsale musste vorgegeben werden. Anhand der in /LAU 14/ ermittelten Dicke und Strömungsgeschwindigkeit der Rinnsale wurde die Sohlschubspannungsgeschwindigkeit der Rinnsale u_* ermittelt. Aus den Aerosolparametern wurde dann die kritische Sohlschubspannungsgeschwindigkeit $u_{*,c}$ bestimmt.

u_* = 1,3E-2 m/s

$u_{*,c}$ = 6,3E-3 m/s

Da $u_* > u_{*,c}$ ist, kommt es in Test 4 zur Partikelerosion. Die Erosionsrate ist

$$k_E = k_{E,0} * 2{,}88 \text{ 1/s} \quad (2.31)$$

Mit der Erosionskonstanten $k_{E,0} \approx 0{,}013$ wurde anhand von Detailergebnissen zu Test Nr. 4 grob bestimmt. Damit ist die Erosionsrate unter den unfallnahen Bedingungen im THAI-LAB-Test $k_E \approx$ 3,7 E-2 1/s.

Abb. 2.26 zeigt die mit AULA berechneten erodierten Ag-Massen. Der Verlauf der Erosionsrate wird recht gut wiedergegeben. Wie erwartet wird das Abwaschverhalten durch die kleinen, kohäsionsbehafteten Partikel dominiert. Dies ist daran zu erkennen, dass auch für größere Zeiten die gemessene Erosionsrate nicht ganz verschwindet. In der Rechung werden sie allerdings für t > 60 s noch unterschätzt.

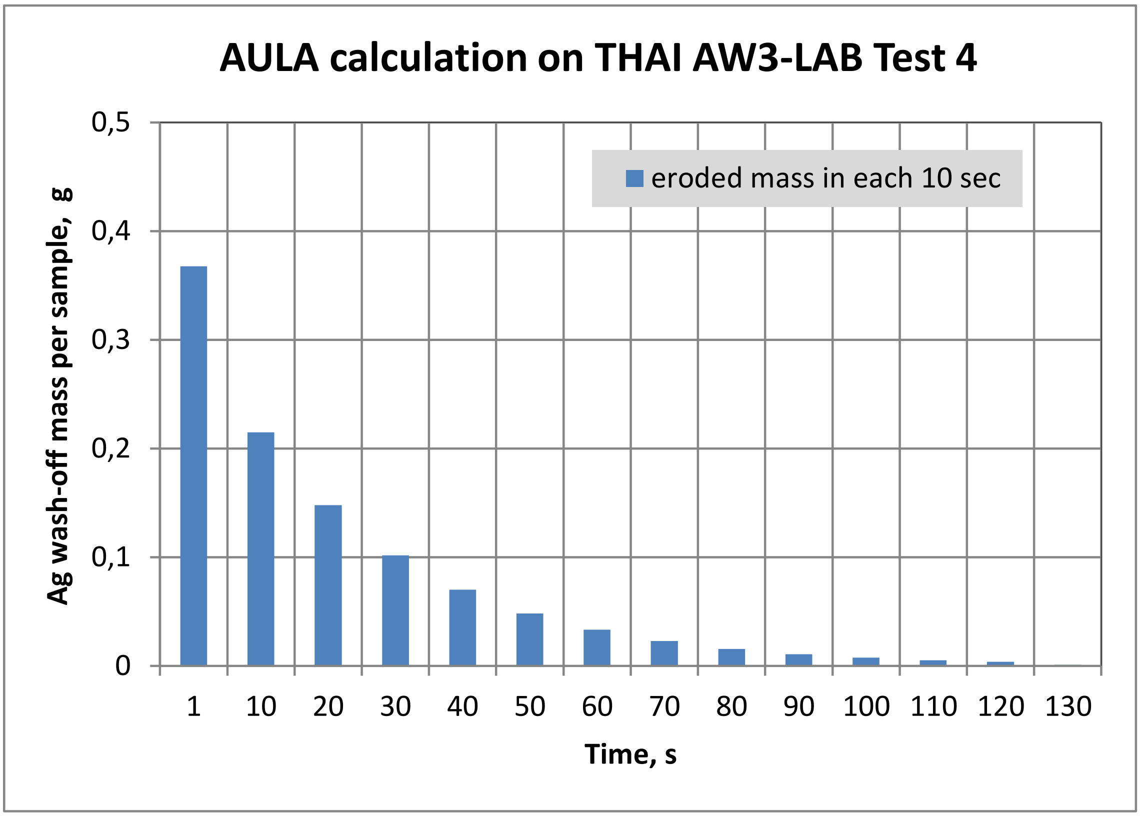


Abb. 2.26 Interpretation von Versuch 4 mit AULA

Bei einem idealen Erosions-Verhalten nach Shields würden alle Partikel, die das Shields-Kriterium erfüllen, rasch erodieren. Nur größere Partikel blieben abgelagert auf der Oberfläche.

Erst wenn AULA in COCOSYS integriert ist – dies ist im Folgevorhaben geplant – können alle 15 Versuche systematisch ausgewertet werden. Dazu gehören auch die Berechnung der Kondensat-Ablaufgeschwindigkeit und der Rinnsaldicke. Weiter ist zu prüfen, ob die bestimmte Erosionskonstante auf die anderen Versuche und den Reaktorfall zutrifft. Anzahl und Dicke der Rinnsale müssen gemäß den Messungen aus den THAI-Versuchen vorgegeben werden.

2.3.5.3 Lösliche Aerosole

An der Modellierung des Abwaschverhaltens der löslichen Aerosole hat sich nichts Wesentliches geändert. Ist genügend Kondensat an einer Wand- oder Bodenfläche vorhanden, lässt sich das Material komplett auflösen und wird nach unten abgewaschen. Zufließendes, frisches Kondensat verdünnt die Lösung permanent. Dies führt dazu, dass schließlich das gesamte gelöste Aerosolmaterial abgewaschen wird. Der in COCOSYS modellierte Ansatz hat sich bislang gut bewährt. Damit konnte z. B. der THAI-Abwaschversuch AW-2 mit löslichem CsI-Aerosol gut nachgerechnet werden /HOE 10/. Wie bei den unlöslichen Aerosolen auch müssen die Angaben zu den Rinnsalen vorgegeben werden.

2.3.5.4 Iod

Zum Abwaschen von Iod wurde bereits früher ein Wasserfilmmodell entwickelt und anhand der THAI-Versuche Iod-21 und Iod-28 überprüft /SPE 12/. Im Modell werden alle relevanten Iodspezies bilanziert, alle Reaktionen in wässriger Phase und die Ablagerung auf den farbbeschichteten Strukturen berechnet. Wie für AULA ist der Einbau in COCOSYS erst bei abgeschlossener Umstrukturierung des AFP-Hauptmoduls sinnvoll.

2.3.5.5 Fazit

Mit dem Zusammenführen der drei Abwasch-Modelle für unlösliche (AULA) und lösliche Aerosole sowie für Iod (Filmmodell) im umstrukturierten Hauptmodul AFP wird erstmals eine geschlossene Beschreibung der komplexen Vorgänge in COCOSYS-AIM möglich sein. Die thermohydraulischen Bedingungen, wie Kondensations- und Drainagerate, Temperatur etc. sind dann für alle Teilmodelle dieselben. Der Grad der Modellierung in AULA und dem Filmmodell geht deutlich über den in vergleichbaren Unfallcodes hinaus. In COCOSYS-AIM wird damit eine bekannte Unsicherheit in der Berechnung des radioaktiven Quellterms aus der Anlage deutlich reduziert.

2.3.6 CsI und IOx-Zersetzung

2.3.6.1 Hintergrund

Bei einem schweren Reaktorunfall wird Iod zu einem großen Teil als CsI-Aerosol in das Containment freigesetzt. Es lagert sich dort auf Boden und Wänden ab. Der Teil, der nicht mit dem Kondensat in den Sumpf gewaschen wird, bleibt auf den Oberflächen im Containment.

Im Rahmen des OECD-Projects STEM wird in den AER-Tests, die in der EPICUR-Anlage durchgeführt werden, die radiolytische Zersetzung dieser abgelagerten Aerosole aus CsI und IOx unter radioaktiver Bestrahlung untersucht. Dabei wird flüchtiges I_2 freigesetzt. Im Reaktorfall kann die Freisetzung von I_2 zu einer Verstärkung des Iod-Quellterms aus der Anlage führen.

In COCOSYS-AIM und in den meisten Unfallcodes ist die radiolytische Zersetzung von Iod-Aerosolen derzeit nicht modelliert. Es wurde daher auf der Basis der AER-Ergebnisse ein Modell entwickelt und erste Rechnungen damit durchgeführt.

2.3.6.2 Modell

In den Experimenten zur CsI-Zersetzung laufen im Wesentlichen die in Abb. 2.27 dargestellten Reaktionen und Prozesse ab. Am Coupon erfolgen die eigentliche radiolytische Zersetzung und die Freisetzung von I_2. Dazu wird Wasserdampf aus der Luft benötigt. Ist der Coupon farbbeschichtet, kann ein Teil des entstehenden I_2 zu Organoiod (RI) weiterreagieren. In der Gasphase reagiert ein Teil des freigesetzten I_2 mit den Radiolyseprodukten der Luft zum feindispersen Aerosol IOx, das agglomeriert und sich an den Oberflächen des EPICUR-Behälters niederschlägt. Ein anderer Teil des I_2 lagert sich auch direkt an den Stahloberflächen des EPICUR-Behälters ab und reagiert zu FeI_2.

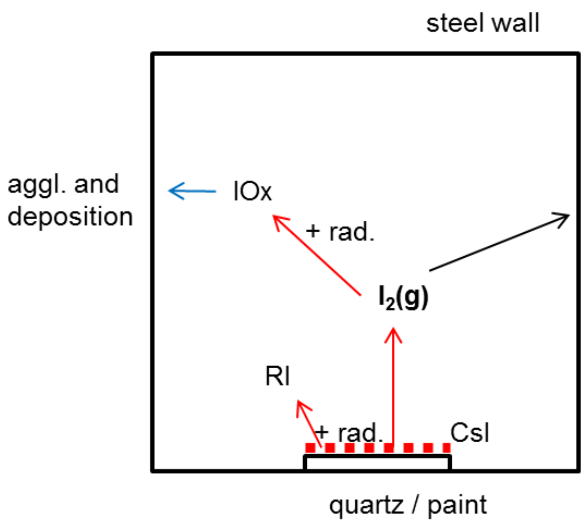


Abb. 2.27 Reaktionen und Prozesse in den AER-Experimenten

Die Reaktionen des frisch produzierten I_2 hängen zuerst von den Bedingungen an der Oberfläche ab. Zuerst wird die für die Zersetzung notwendige Feuchte vom hygroskopischen CsI aus der Luft aufgenommen. Das produzierte, gasförmige I_2 wird von der CsI-Schicht so lange physisorbiert, bis Sättigung erreicht ist. Auf dem Quartz-Glas-Coupon wird praktisch kein I_2 adsorbiert (Abb. 2.28, links). Erst danach kann $I_2(g)$ in die Gasphase entweichen. Besteht der Coupon aus Farbe (Abb. 2.28, Mitte), sind die erwähnten Schritte gleich, nur reagiert abgelagertes I_2 zusätzlich mit der Farbe, wobei RI gebildet wird. Beide Iodspezies entweichen in die Gasphase.

Unter Reaktorbedingungen ist das CsI-Aerosol nur ein kleiner Teil der gesamten Aerosolbeladung. Aus den PHEBUS-Versuchen wurde ein CsI-Anteil von etwa 3 % abgeschätzt. Das entstehende I_2 wird in der Aerosolschicht von den nicht-reaktiven Aerosolen adsorbiert bzw. von den reaktiven Aerosolen, wie Silber, chemisorbiert. Es ist daher zu erwarten, dass die Netto-Freisetzung von I_2 in die Gasphase geringer als in den AER-Tests ist.

Für die Modellierung in AIM wurde die Reaktion von CsI mit den Radiolyseprodukten der Luft in Gegenwart von Wasserdampf wie folgt formuliert:

$$CsI(dep) + H_2O + rad. \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} \frac{1}{2} I_2(g) + CsOH \qquad (2.32)$$

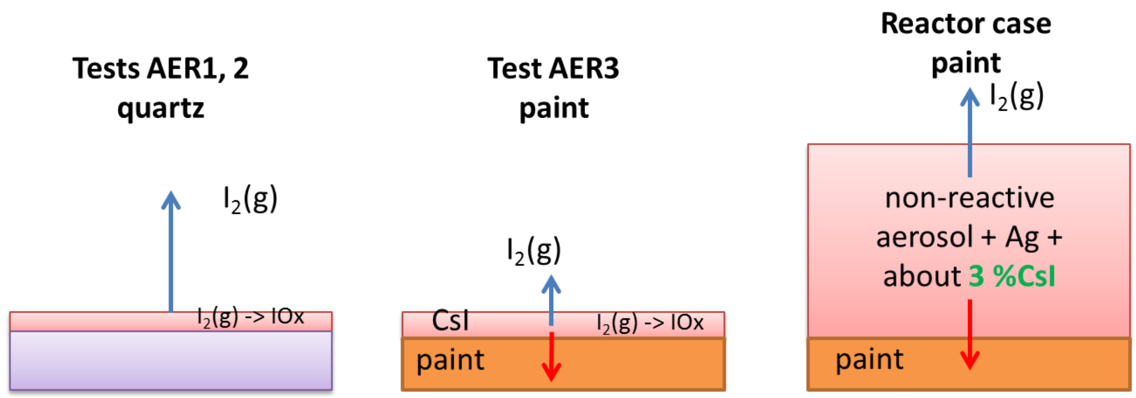


Abb. 2.28 Reaktionen von frisch produzierten I_2 an der Oberfläche

Die kinetische Gleichung für die I_2-Konzentration ist dann

$$\frac{I_2(g)}{dt} = (rh - rh_0)\, k_1\, DR(g)\, CsI(dep)\, \frac{A_C}{V}\, 1.E3 \tag{2.33}$$

CsI, I_2	Konzentrationen (mol/m² bzw. mol/l)
rh	relative Feuchte, %; rh_0: rF-Schwelle, darunter keine Zersetzung
V	Volumen der Gasphase (l)
DR	Dosisrate (kGy/h)
A_C	gesamte effektive Oberfläche der abgelagerten CsI-Partikel, (m²)
1,0E3	Dimensionsfaktor

Im Modell werden vereinfachende Annahmen getroffen, so z. B. dass die CsI-Zersetzung linear von der Feuchte und von der Dosisleistung abhängt sowie dass alles CsI zersetzt werden kann. Diese Annahmen müssen an weiteren Experimenten überprüft werden. Mit dem neuen Modell wurde der Versuch AER1 nachgerechnet. Abb. 2.29 zeigt die Messwerte. Ca. 30 % der CsI-Menge wurden zersetzt.

In der Rechnung (Abb. 2.30) ist die zersetzte Masse mit 53 % höher. Dennoch wird der Freisetzungsverlauf qualitativ gut wiedergegeben. Die Adsorption von frischem I_2 in der Aerosolschicht sowie die Diffusion von Wasserdampf zu den CsI-Partikeln sind im Modell nicht berücksichtigt.

Die Zersetzung des IOx-Aerosols läuft im Prinzip ähnlich ab und kann daher analog modelliert werden. Da seine Menge im Reaktorfall viel geringer als die des CsI ist,

wurde die Modellierung der entsprechenden AER-Versuche mit IOx-Aerosol vorerst zurückgestellt.

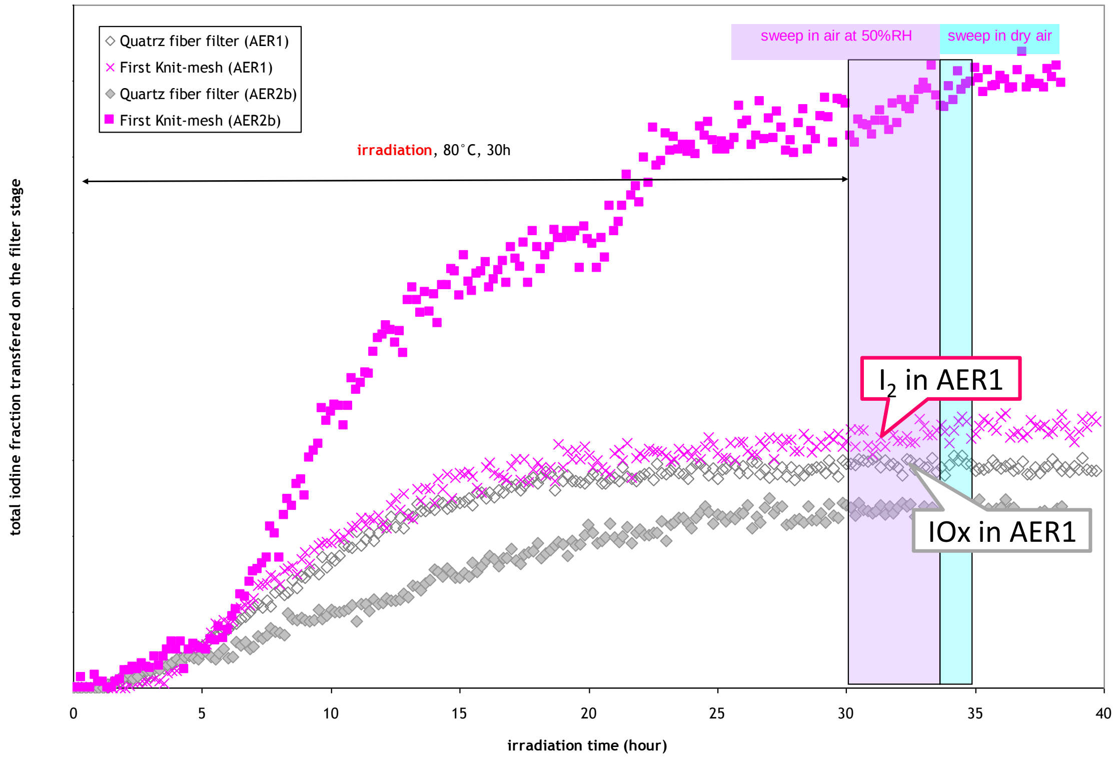


Abb. 2.29 Test AER1: gemessene I_2 und IOx-Konzentration in der Gasphase

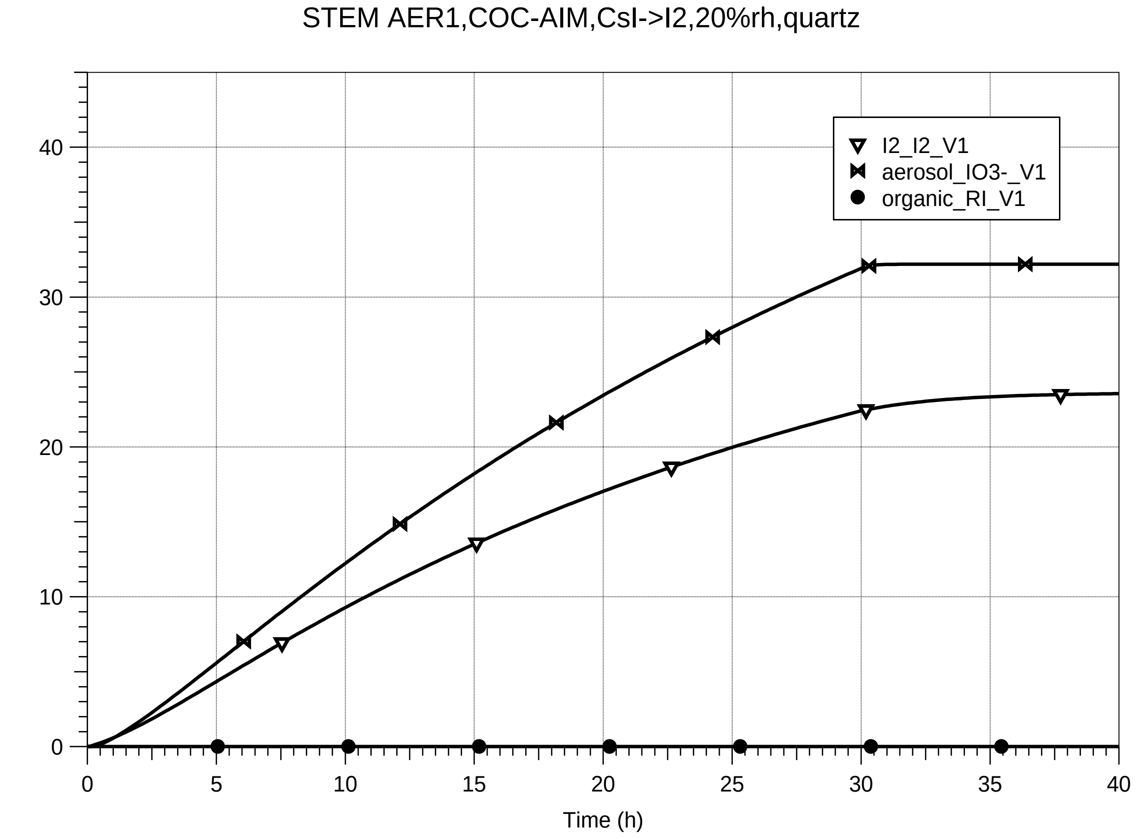


Abb. 2.30 COCOSYS-AIM-Nachrechnung des Versuchs AER1

2.3.6.3 Fazit

Im neuen AIM-Modell zur Zersetzung von CsI unter radioaktiver Bestrahlung sind alle als relevant erkannten Reaktionen berücksichtigt. Noch nicht berücksichtigt sind die Prozesse, die aller Voraussicht nach für den verzögerten Beginn der I_2-Freisetzung verantwortlich sind: Die Dampfdiffusion zum CsI-Salz und der I_2-Transport durch die CsI-Schicht an die Oberfläche. Es sollen noch weitere AER-Tests mit COCOSYS/AIM ausgewertet werden. Danach soll das Modell auf PHEBUS-Tests angewendet werden. In diesen war CsI-Aerosol mehrere Tage auf dem sogenannten elliptischen Boden des 10 m^3 Behälters abgelagert, bevor es abgewaschen wurde. Während der trockenen Ablagerung muss es zu einer radiolytischen Zersetzung von CsI gekommen sein.

Unter Unfallbedingungen macht der CsI-Anteil am gesamten Aerosol im Containment nur etwa 3 % aus (ca. 30 kg CsI von ca. 1000 kg gesamten Aerosol). Daher wurden Tests mit Mischaerosol vorgeschlagen, die in der geplanten Fortführung des STEM-Projekts durchgeführt werden sollen.

2.4 Aktualisierung der Code-Infrastruktur

2.4.1 Erstellung eines Moduls zur Unterstützung der Kopplung von Modulen

Mittlerweile sind bereits eine Reihe von Modulen in das COCOSYS-Programmsystem eingebunden und miteinander gekoppelt worden (siehe Kap. 2.1). Diese Kopplungen werden fortlaufend erweitert bzw. es werden neue Kopplungen, wie zum Beispiel die Anbindung zwischen COCOSYS und ATHLET-CD bei RDB-Versagen oder die Anbindung von CoPool, hinzugefügt. Dabei ist es notwendig, die entsprechenden Randbedingungen bereitzustellen und die Ergebnisse der anderen Programme zu verarbeiten. Zusätzlich fallen Aufgaben wie Datenaustausch zwischen den Modulen (in COCOSYS über PVM), Aufbereitung der Daten (z. B. Extraktion von Daten und Integration von Massenströmen und Erstellen von Tabellen) an.

Aufgrund der fortlaufenden Modellerweiterungen werden dabei mittlerweile für eine Kopplung umfangreiche Daten verarbeitet. Die Verarbeitung erfolgt spezifisch für jede einzelne Variable, das heißt es müssen die Routinen zum Senden, Empfangen, Aufbereiten usw. jeweils für jede Erweiterung entsprechend ergänzt werden. Diese Vorgehensweise ist auf Dauer sehr aufwändig und zum Teil auch fehleranfällig.

Um diese Arbeitsschritte zu vereinfachen, wurde ein Konzept entwickelt und in COCOSYS implementiert, in dem vorgesehen ist, die auszutauschenden Daten auf eine homogene und ergänzungsfähige Datenstruktur zu übertragen. Damit ist es dann möglich, generalisierte Routinen und Funktionen zu definieren, welche die notwendigen Aufgaben in Bezug auf diese neue Datenstruktur erfüllen (z. B. Senden und Empfangen von Daten). Diese Routinen sind dann allgemein gültig und müssen daher nicht ständig aktualisiert werden, wenn die Inhalte und der Umfang der Datenstruktur modifiziert werden, z. B. durch Ergänzungen etc.

Die Datenstruktur basiert auf einem sogenannten Daten-Element, welches einen Zeiger (Pointer) auf die verschiedenen Datentypen (wie Integer-, Realvektor aber auch spezielle Operatortypen) enthält. Je nach tatsächlichem Typ wird der entsprechende Speicherplatz für den Pointer allokiert. Ferner enthält dieses Daten-Element insgesamt vier Pointer zu Nachbar-Elementen: Dies sind einerseits die Zeiger zu dem vorherigen Element und zum nächsten Element auf der gleichen Ebene und andererseits die Zei-

ger zum Eltern-Element (Parent) auf der vorherigen Ebene sowie zum Kind-Element (Child) auf der nächsten Ebene. Das Konzept dieses Daten-Elements ist in Abb. 2.31 dargestellt. Das Konzept der Verknüpfung von Daten-Elementen wird in Abb. 2.32 dargestellt.

Zeitabhängige Größen werden in sogenannten „Ketten“ abgebildet. Da die Anzahl der Zeitpunkte vorab nicht bekannt ist, können an diese Kette beliebig Elemente angehängt werden. Ferner wurden Datentypen erstellt, die ein Argument (hier: Zeitpunkt) und einen Realvektor bzw. eine Realmatrix enthalten. Eine solche Matrix wird dann zum Beispiel für den Volumenstrom von einer 2D-Wandoberfläche in den Sumpf verwendet.

Die vollständige Liste von den zur Verfügung stehenden Datentypen ist im COCOSYS Referenz-Handbuch beschrieben.

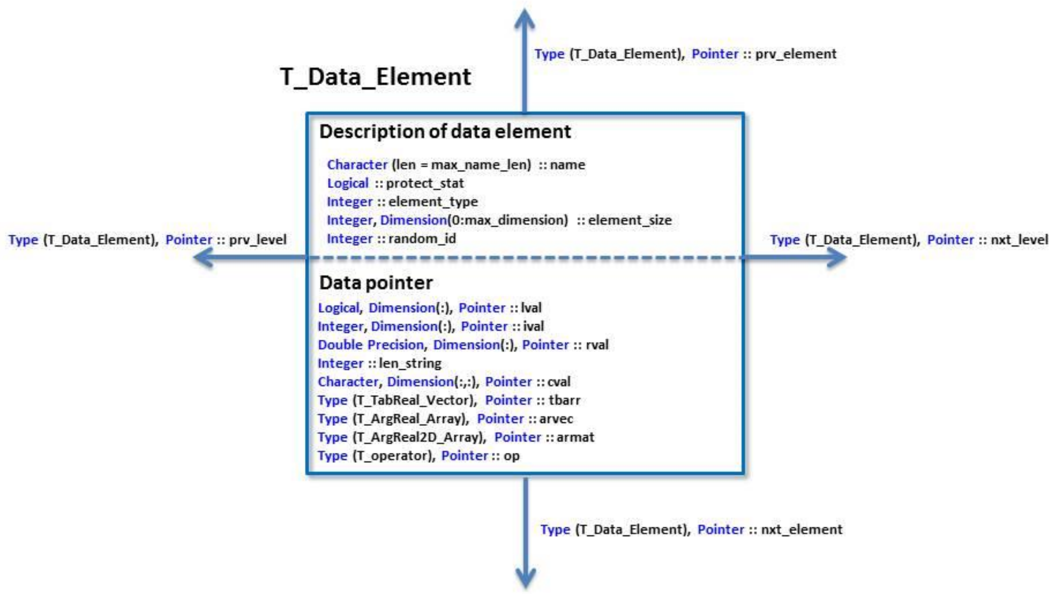


Abb. 2.31 Struktur eines Daten-Elements

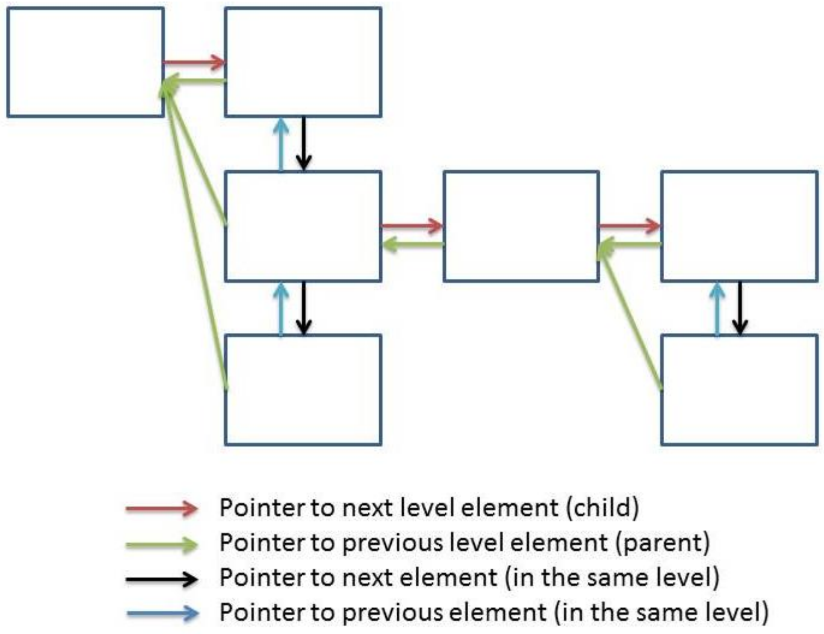


Abb. 2.32 Konzept zur Verknüpfung von Daten-Elementen

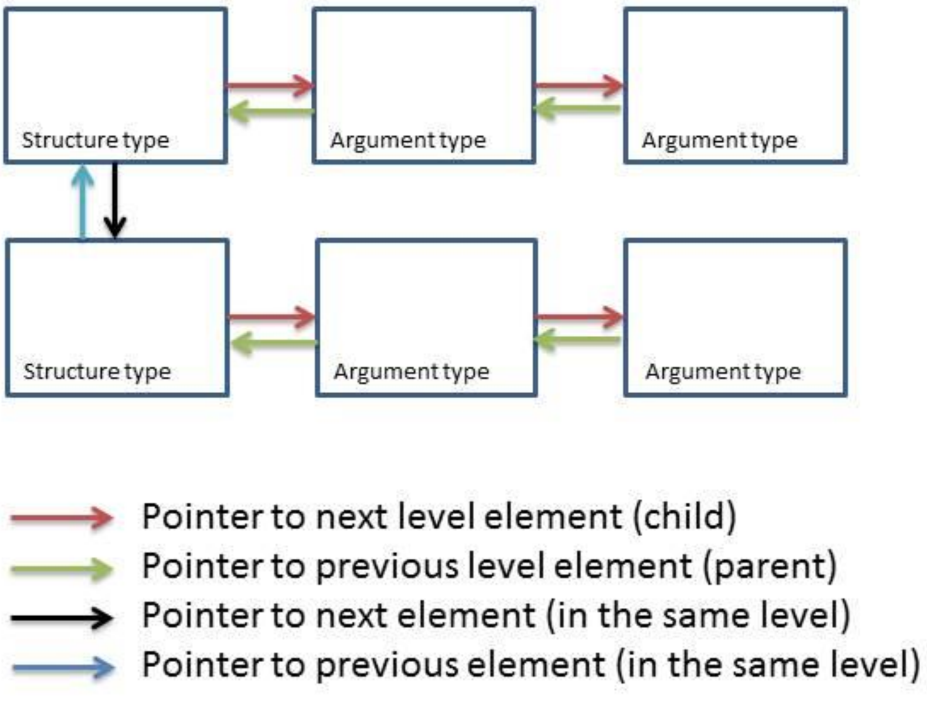


Abb. 2.33 Konzept zur Speicherung von zeitabhängigen Größen

Im Folgenden werden die wichtigsten erstellten Routinen zum Management der Daten-Elemente angegeben. Für die vollständige Beschreibung siehe Referenz-Handbuch.

– Put
  Generische Routine zum Erstellen und Einbinden eines neuen Datenelements in die Vernetzung.

– Get
  Generische Routine zum Auslesen eines Datenelements.

– Delete_Data_Element
  Löschen einer Daten-Element-Struktur (Löschen eines Element inklusive aller Child-Elemente).

– Delete_Argument_Element
  Löschen aller Daten-Element-Strukturen vom ‚Argument'-Typ sofern das Argument kleiner als das vorgegebene Argument ist. Mindestens zwei Elemente bleiben erhalten. Mit dieser Routine können mit einem Aufruf alle nicht mehr benötigten „Tabellenwerte" gelöscht werden.

– Insert_Data_Element
  Einfügen einer Daten-Element-Struktur in eine bestehende Struktur. So werden nach dem Empfang einer Daten-Element-Struktur diese in die zentrale Struktur eingefügt.

– Extract_Data_Element
  Auslesen einer vorgegebenen Daten-Element-Struktur aus einer anderen Struktur. Hiermit können Teile aus einer ‚zentralen' Struktur ausgelesen werden und z. B. an ein Hauptmodul geschickt werden.

– Evaluate_Data_Element_Structure
  Auswertung einer Daten-Element-Struktur nach vorgegebenen Regeln (Operatoren). Mit dieser Routine werden Teile einer Struktur ausgelesen und bearbeitet (z. B. Integration von Volumenströmen) und in einer Zielstruktur abgespeichert. Details hierzu sind im COCOSYS-Referenz-Handbuch beschrieben.

– Pack_Data_Element
  Einfügen einer Daten-Element-Struktur in einen Nachrichtenbaustein zur Kommunikation zwischen Modulen (PVM-Message).

- Unpack_Data_Element
  Auspacken einer Daten-Element-Struktur aus einem Nachrichtenbaustein zur Kommunikation zwischen Modulen (PVM-Message)
- Restart_Data_Element
  Speichern/Lesen einer Daten-Element-Struktur in/aus dem Restartvektor
- Print_Data_Element
  Ausdrucken einer Daten-Element-Struktur

Dieses Konzept wurde für die COCOSYS-CoPool-Kopplung erstmals verwendet.

2.4.2 Schnittstelle für das RDB-Versagen

In der Programmkette ATHLET-CD/COCOSYS fehlt noch die Ausgestaltung der Schnittstelle zwischen der späten Phase der Kernzerstörung im Reaktor und der Ex-Vessel-Situation, also der Datenaustausch zur Schmelzefreisetzung bei RDB-Versagen. In RS1508 war geplant, diese Schnittstelle unter Einbezug strukturmechanischer Methoden in der Programmkette ATHLET-CD/COCOSYS bereitzustellen.

Die Arbeiten, die entsprechend des anvisierten Ablaufdiagramms innerhalb der letzten ca. 6 Monaten vor Projektende geplant waren, waren teamübergreifend mit GRS-Codeentwicklern für Containment, Kühlkreislauf sowie mit Spezialisten aus der Strukturmechanik zu koordinieren.

In einem Treffen der GRS-Codeentwickler für Kühlkreislauf und Containment zu diesem Arbeitspunkt wurden erste strategische Vorüberlegungen zur zukünftigen Kopplungsweise der Codes erörtert. Da in der Kopplung der beiden Codes nach RDB-Versagen noch etwas Erfahrung gewonnen werden muss, um weitere Anforderungen zu definieren, wurde von den Teams für einen ersten Schritt zunächst eine vereinfachte Anbindung favorisiert, in der von ATHLET-CD nur ein Minimalsatz der von einer äquivalenten COCOSYS/MEDICIS-Rechnung im Stand-alone-Betrieb benötigten Eingabe-Daten bereit gestellt wird. Dies sind im Wesentlichen die strukturelle Masse der bei RDB-Versagen freigesetzten Schmelze (Brennstoff, Stahl und Strukturmaterialien) und ihrer Temperatur sowie die integrale Nachzerfallswärmeleistung als Funktion der Zeit. Für die Verfolgung der Spaltproduktfreisetzung durch die Schmelze-Beton-Wechselwirkung in der Reaktorgrube werden darüber hinaus noch die Element-

Massen der Spaltprodukte, die zum Zeitpunkt des RDB-Versagens in der Kernschmelze präsent sind, benötigt. Die Schmelze kann dabei nach Metallen oder Oxiden geschichtet sein, oder durchmischt. Diese und weitere technische Anforderungen und benötigte Eingabedaten seitens COCOSYS/MEDICIS wurden in einer Notiz zusammengestellt und den beteiligten Entwicklern zur Verfügung gestellt.

Auf der Seite von COCOSYS wurde mit dem Daten-Element-Modul (siehe Abschnitt 2.4.1) zunächst eine wichtige Grundlage geschaffen, um zukünftige Kopplungsarbeiten zwischen COCOSYS-Modulen auf einer generalisierten und damit weniger fehleranfälligen Ebene durchzuführen, die auch für das Anbinden des RDB-Versagens an COCOSYS genutzt werden soll.

An der Bereitstellung der benötigten Daten für den Start des COCOSYS/MEDICIS-Moduls wird zurzeit von dem ATHLET-CD-Entwicklerteam gearbeitet. Weitere konkrete Fortschritte auf der Seite von COCOSYS müssen auf das Nachfolgevorhaben zu RS1508 verschoben werden, da innerhalb des ursprünglich geplanten Zeitfensters keine weitere teamübergreifende Ressourcenverfügbarkeit gegeben war. Die technische Kopplung zur Schmelzefreisetzung aus dem RDB in die Reaktorgrube steht unmittelbar im Nachfolgevorhaben zur Bearbeitung an. Im weiteren Verlauf des Nachfolgevorhabens ist dann auch die Einbindung strukturmechanischer Aspekte geplant.

2.4.3 Anbindung von CoPool

2.4.3.1 Hintergrund

Beim Fraunhofer Institut ITWM in Kaiserslautern wird im Rahmen des Projekts 1501443 das Rechenprogramm CoPool zur vereinfachten dreidimensionalen Berechnung der Strömungs- und Temperaturverteilung in Wasservorlagen entwickelt. Im Rahmen des Vorhabens RS1508 erfolgte in Zusammenarbeit zwischen GRS und ITWM die Kopplung mit COCOSYS.

Die Modellierung in CoPool basiert auf Navier-Stokes-Gleichungen in drei Dimensionen unter Verwendung der Boussinesq-Approximation für die flüssige Phase und die Lösung der 3D-Wärmeleitungsgleichungen für Wandstrukturen /GOR 13/. Die Navier-Stokes-Gleichungen und die Wärmeleitungsgleichungen werden auf separaten Gittern diskretisiert und durch Interpolation der überlappenden Bereiche gekoppelt /GOR 14/.

Durch verschiedene Vereinfachungen in CoPool werden relativ kurze Rechenzeiten erreicht; dadurch ist eine Kopplung mit COCOSYS sinnvoll.

Es handelt sich um folgende Vereinfachungen:

- Es kann ein relativ grobes Gitter für den Fluidbereich verwendet werden.
- Es werden die Boussinesq-Approximation und die Projektionsmethode nach Chorin zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung verwendet.
- Oberflächenwellen werden nicht berücksichtigt.
- Durch die Verwendung von Standard-Objekten (Kugeln, Kubus und Zylinder), welche über logische Operationen verknüpft werden können, wird für jedes Wandobjekt ein optimales Gitter erzeugt, was schnellere Lösungen ermöglicht.

Neben dem CoPool selbst wurde ein zugehöriger Präprozessor entwickelt, welche die CoPool-Geometrie (Gitter für Fluid und Wände) erzeugt, aber auch die zusätzlichen geometrischen Informationen zur Kopplung zwischen CoPool und COCOSYS bereitstellt. Die genaue Vorgehensweise ist in den CoPool-Handbuchs beschrieben. Zielsetzung ist es, eine Fluidzelle in CoPool der entsprechenden Lumped-Parameter-Zone in COCOSYS bzw. einer Wandoberfläche in CoPool eine Wandstruktur in COCOSYS zuzuordnen. Dazu wird ein überlagertes Gitter verwendet und es werden automatisch ‚Zonen' und ‚Wandoberflächen' erzeugt (Abb. 2.34). Die automatisch generierten Objekte werden nachbearbeitet und der tatsächlichen COCOSYS Eingabe angepasst.

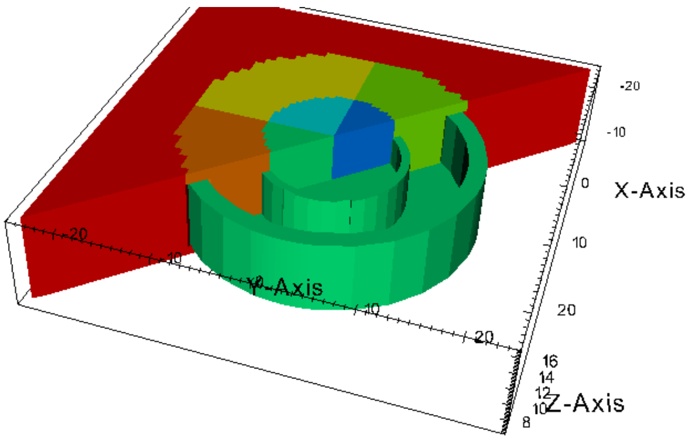


Abb. 2.34 Generierte Zonen im CoPrep-Präprozessor

2.4.3.2 Konzept der Kopplung

In diesem Abschnitt werden das Konzept der Kopplung und der Datenaustausch zwischen CoPool und COCOSYS beschrieben. Der Datenaustausch bezieht sich dabei auf die Sumpfvolumina (oder andere Volumina mit großen Wasserpools), der Austausch zwischen diesen Volumina, die Wechselwirkungen an der Sumpfoberfläche, der Datenaustausch bezüglich Wandoberflächen und der Austausch aufgrund von äußeren Quellen und Senken (z. B. Drainageströme, Pumpsysteme usw.). Das Gesamtsystem wird in Abb. 2.35 dargestellt.

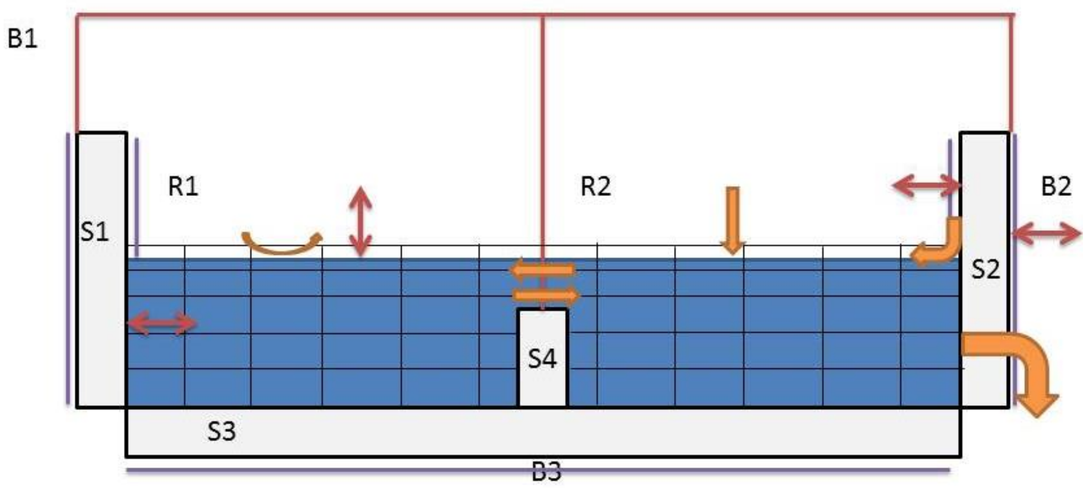


Abb. 2.35 Schnittstellen zwischen CoPool und COCOSYS

Sumpfvolumina

Ziel ist es, dass Zustände im Sumpf eines DWR oder in anderen großen Wasserpools im Containment mit dem CoPool-Programm berechnet werden. Da z. B. die Sumpftemperatur auch in AFP (COCOSYS-Modul für das Aerosol- und Spaltproduktverhalten) für die Berechnung der Iodchemie verwendet wird, müssen seitens CoPool entsprechende gemittelte Größen zur Verfügung gestellt werden. Folgende Größen werden in CoPool berechnet: Mittlere Sumpftemperatur, Sumpfvolumen, relativer Wasserstand, Sumpfoberfläche und gemittelte Sumpfoberflächentemperatur. Die berechneten Größen werden an dem Thermohydraulik-Hauptmodul (THY) übergeben und die entsprechenden Größen im Nichtgleichgewichtsmodell überschrieben. Dabei werden Ströme der physikalischen Größen im Treiber integriert und im Zielmodul wieder abgeleitet, um mögliche Spitzen erfassen zu können. Alle anderen Größen werden zeitlich interpoliert. Für den Austausch an der Sumpfoberfläche werden die gemittelte

Sumpfoberflächentemperatur und die von CoPool berechnete Sumpfoberfläche verwendet. Es wird ebenfalls der relative Wasserstand aus CoPool verwendet, um ein konsistentes Verhalten (z. B. beim Überprüfen von Kriterien für das Ein- oder Ausschalten von Pumpsystemen in Abhängigkeit von dem Wasserstand) zwischen CoPool und COCOSYS zu gewährleisten.

Austausch zwischen Sumpfvolumina

CoPool berechnet die nach Richtung getrennten Volumenströme zwischen den einzelnen Zonen. Diese Daten werden z. B. im AFP-Hauptmodul benötigt, damit ein entsprechender Spaltprodukttransport berechnet werden kann. Für das THY-Modul sind diese Größen nicht relevant.

Wechselwirkung an Sumpfoberflächen

An den Sumpfoberflächen müssen der Wärmeaustausch und Massentransfer berücksichtigt werden. Zur Berechnung der Kondensation bzw. der Verdampfung an einer Sumpfoberfläche benötigt man unter anderem Stoffwerte sowie den Dampfpartialdruck in der Atmosphäre. Um einen Datenaustausch von Stoffwerten zu vermeiden, wird diese Berechnung in COCOSYS durchgeführt. Dabei wird angenommen, dass die lokale Sumpfoberflächentemperatur sich nicht wesentlich von der mittleren Sumpfoberflächentemperatur unterscheidet. COCOSYS übergibt nun den Wärmestrom $\dot{Q}_c$ und den Kondensationsvolumenstrom $\dot{V}_c$ an CoPool. Hieraus wird mittels der Atmosphärentemperatur T_{atm} und der mittleren Sumpfoberflächentemperatur $\bar{T}_{surf}$ sowie der Sumpfoberfläche A ein mittlerer Wärmeübergangskoeffizient $\bar{\alpha}$ berechnet, Gl. (2.34), welcher dann in CoPool für die einzelnen zugehörigen Fluidzellen verwendet wird.

$$\bar{\alpha} = \frac{\dot{Q}_c}{A\left(T_{atm} - \bar{T}_{surf}\right)} \tag{2.34}$$

Wechselwirkung an Wandoberflächen

Die Berechnung der Wärmeleitung in Wandstrukturen wird prinzipiell CoPool überlassen, da es als CFD-Werkzeug für diese Aufgabe besser geeignet ist. Wandoberflächentemperaturen werden allerdings auch in anderen Hauptmodulen wie z. B. in AFP benötigt. Daher müssen entsprechende Mittelwerte in CoPool berechnet werden. Weiterhin soll es möglich sein, die ‚Außenseiten‘ der Strukturen nicht mit CoPool koppeln zu müssen. Daraus folgt, dass die Wärmeleitung in beiden Programmen berechnet

wird und daher Daten bzgl. der Wärmeströme an den Schnittstellen zwischen Fluid und Wänden ausgetauscht werden müssen.

Es wird zwischen dem „nassen“ Bereich unterhalb des Wasserspiegels und dem „trockenen“ Bereich unterschieden. Hier sind die Wärmeübergänge sehr unterschiedlich. Daher wird vorausgesetzt, dass das erweiterte Wärmeleitungsmodell mit möglicher vertikaler Segmentierung von Wandstrukturen verwendet wird.

Unterhalb des Wasserspiegels berechnet CoPool die zugehörige Wandoberfläche, die mittlere Wandoberflächentemperatur in diesem Bereich und den Wärmestrom in die Wandstruktur. Im Wärmeübergangsmodell CO1 werden die entsprechenden Terme überschrieben. Dabei wird ebenfalls die von CoPool berechnete Oberfläche verwendet, um die Konsistenz der Wärmeströme zu gewährleisten. Wie in Abb. 2.35 z. B. zu sehen ist, können die Oberflächen unterschiedlich sein, da in COCOSYS z. B. die Oberkante der Struktur S4 aufgrund des eindimensionalen Ansatzes für die Wärmeleitung nicht berücksichtigt wird.

Oberhalb des Wasserspiegels berechnet COCOSYS den Wärmeübergang zwischen Atmosphäre und Wänden (wie im Falle der Sumpfoberfläche). Somit werden der Wärmestrom und ein möglicher Kondensationsvolumenstrom mit zugehöriger Temperatur an CoPool übergeben. Entsprechend wie bei einer Sumpfoberfläche wird aus dem Wärmestrom ein mittlerer Wärmeübergangskoeffizient berechnet. Dabei werden die von CoPool berechneten Flächeninhalte verwendet. Der Kondensationsvolumenstrom wird als sogenannte Linienquelle, die durch den Schnitt der Wandfläche mit der Wasseroberfläche gegeben ist, in CoPool berücksichtigt.

Externe Massenquellen und -senken

Der Anwender gibt vor, welche COCOSYS-Zonen mit CoPool gekoppelt werden. Daraufhin werden alle möglichen Massenquellen und -senken bzgl. der zugehörigen Sümpfe ermittelt und sogenannte externe Verbindungen definiert. Für diese Verbindungen berechnet COCOSYS den jeweiligen Volumenstrom und die zugehörige Temperatur. Bei Volumenströmen von CoPool nach COCOSYS (Senken) übergibt CoPool die lokale Temperatur an der Entnahmestelle an COCOSYS. Folgende Senken und Quellen sind möglich:

– Drainageverbindungen (DRAIN_BOT)

– Pumpsysteme (PUMP_SYS)

– Einspeisung (über Tabelle)

– Zufuhr über Sprühsysteme (Sumpf als Zielzone)

2.4.3.3 Implementierung der Kopplung

Details zur Implementierung sind für das in Arbeit befindliche, neue Referenzhandbuch zur aktuellen COCOSYS-Version dokumentiert worden. Die Kopplung verwendet dabei die neue Datenbank (Daten Element Struktur). Dies führt zu einer sehr einheitlichen Struktur. Ferner werden die dabei ausgetauschten Daten konsequent interpoliert bzw. bei Strömen integriert und dann wieder abgeleitet. Da die Schnittstelle zwischen CoPool und COCOSYS in FORTRAN geschrieben ist (Verwendung der Daten Element Struktur) wurde eine zusätzliche Ebene für die FORTRAN – C++ Schnittstelle in CoPool eingeführt (Abb. 2.36).

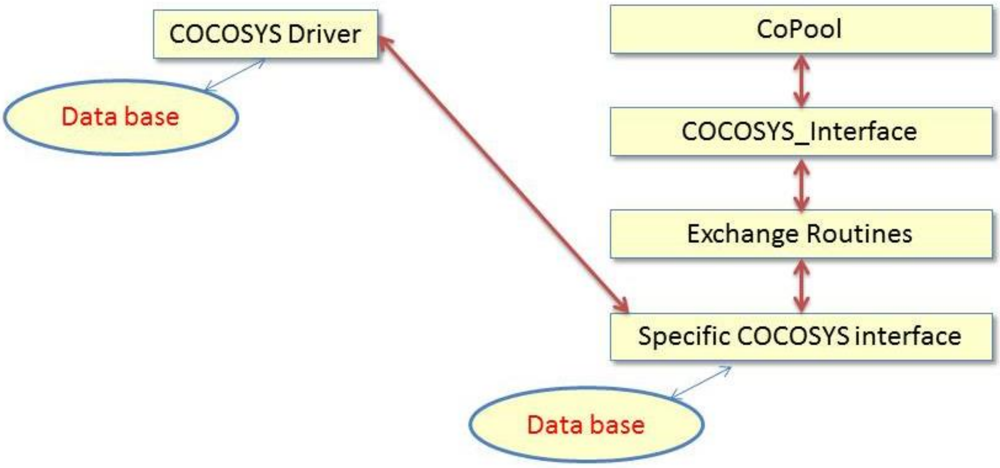


Abb. 2.36 Implementierung der CoPool – COCOSYS Schnittstelle in CoPool

2.4.3.4 Testbeispiel

Die Kopplung wurde anhand von Testbeispielen überprüft. Beispielhaft werden die Ergebnisse für ein Testbeispiel mit einem geteilten Pool dargestellt (Abb. 2.37). Die Betonwände sind jeweils 1 m dick. Der linke Pool (Zone R1) ist zu Beginn mit 25 m^3 Wasser mit einer Temperatur von 20 °C gefüllt (Wasserstand = 1 m). In der Mitte des linken Raumes wird für 1000 s 100 kg/s Wasser mit einer Temperatur von 60 °C eingefüllt.

Wenn das Wasser die Überlaufkante der Zwischenwand übersteigt, wird Raum R2 aufgefüllt. Danach wird auf einen Zirkulationsbetrieb von 50 kg/s umgestellt, wobei das Wasser durch einen Kühler gekühlt wird. Die Entnahme des Wassers erfolgt dabei in der Mitte des linken Pools im Bodenbereich und wird auch wieder in der Mitte oberhalb der Sumpfoberfläche eingespeist. Ein Luftmitriss wird bei der Wasserzufuhr nicht berücksichtigt.

In CoPool werden zunächst die Gitter für das Fluid und die Gitter für die Wandstrukturen erzeugt. Als drittes Gitter werden im ersten Schritt sogenannte ‚Fluid-Zonen' erzeugt (Abb. 2.38). Diese basieren auf dem vorgegebenen Gitter und den von CoPool berechneten Raumzonen. Per Eingabe werden dann diese Zonen teilweise zusammengefasst und über die Zonennamen den entsprechenden Zonen aus COCOSYS zugeordnet.

Basierend auf den dann vorliegenden Informationen werden sogenannte ‚Wandzonen' generiert (Abb. 2.39). Diese werden ebenfalls teilweise wieder zusammengefasst und über die Strukturnamen sowie den Angaben einer Seitennummer (1: links, 2: rechts) den entsprechenden COCOSYS Wandoberflächen zugeordnet.

Details zur Datensatzerstellung finden sich in den Nutzerhandbüchern zu CoPool und COCOSYS.

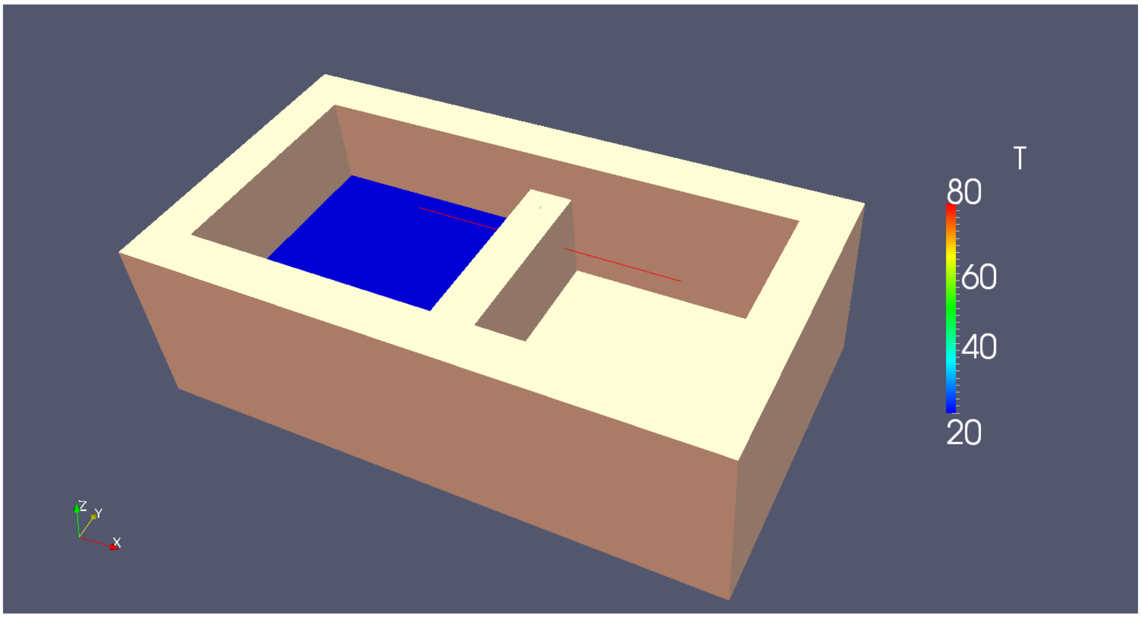


Abb. 2.37 Testbeispiel mit 2 Poolbereichen

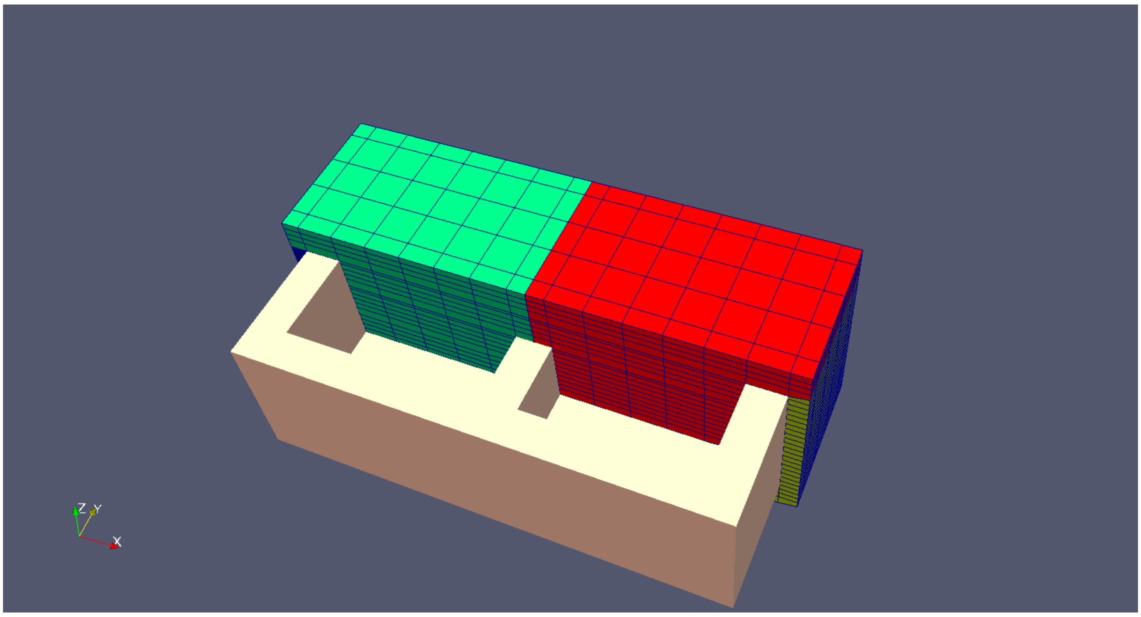


Abb. 2.38 Definition der Fluid-Zonen in CoPool

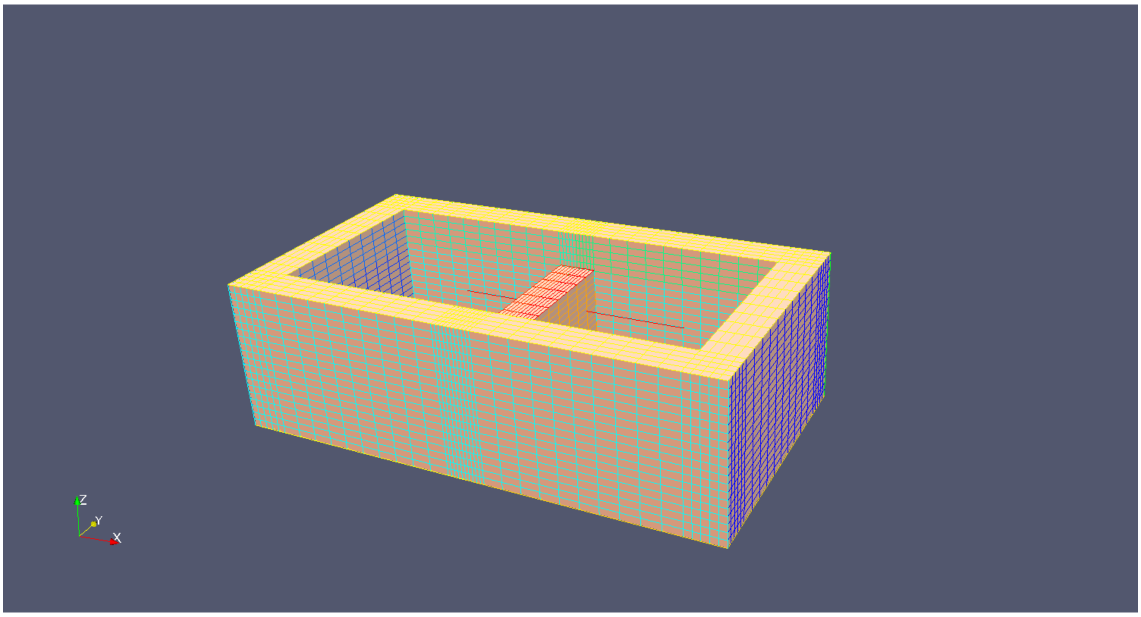


Abb. 2.39 Definition der Wandzonen in CoPool

Für dieses Beispiel wurden eine gekoppelte Rechnung mit CoPool und eine COCOSYS-Stand-alone-Rechnung durchgeführt, um die prinzipiellen Verbesserungen aufzuzeigen. Die Ergebnisse der gekoppelten Rechnung (Bezeichnungen „*coup*“, „*cpl*“) sind mit durchgezogenen Linien dargestellt, die Ergebnisse der Stand-alone-Rechnung (Bezeichnung „*std*“) mit gestrichelten Linien.

In den Abb. 2.40 und Abb. 2.41 ist der Auffüllvorgang zu sehen. Durch die Temperaturschichtung in R1 strömt in den Raum R2 vergleichsweise warmes Wasser, während in

der Stand-alone-COCOSYS-Rechnung mittlere Temperaturen verwendet werden und somit die Temperatur des Sumpfes in Raum R2 unterschätzt wird (Abb. 2.43). Entsprechendes gilt für die Sumpfoberflächentemperatur. Auch hier werden die Temperaturen in der Stand-alone-Rechnung unterschätzt, mit entsprechenden Auswirkungen auf den Gesamtdruck (Verdampfung an der Sumpfoberfläche). Die in CoPool berechneten Temperaturschwingungen sollten noch näher untersucht werden.

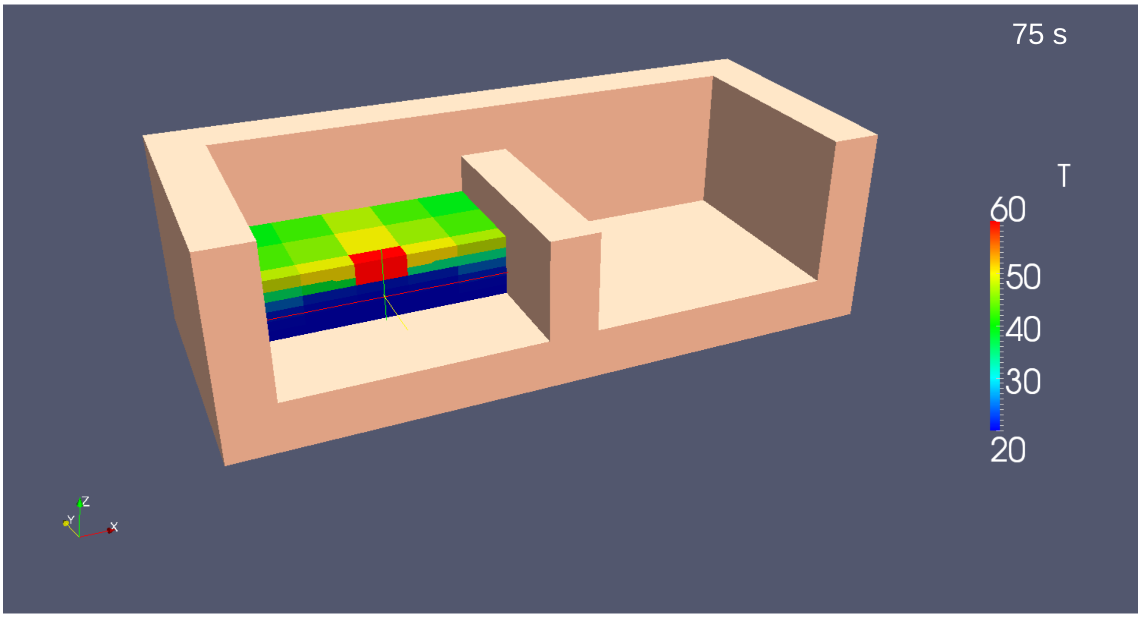


Abb. 2.40 Sumpftemperatur bei 75 s

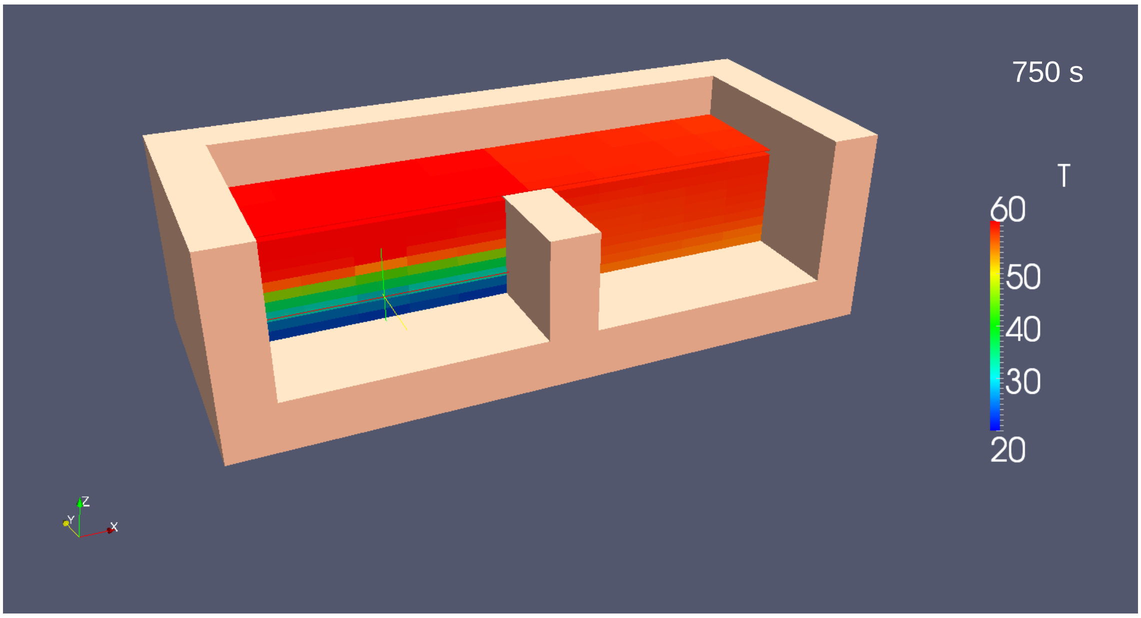


Abb. 2.41 Sumpftemperatur bei 750 s

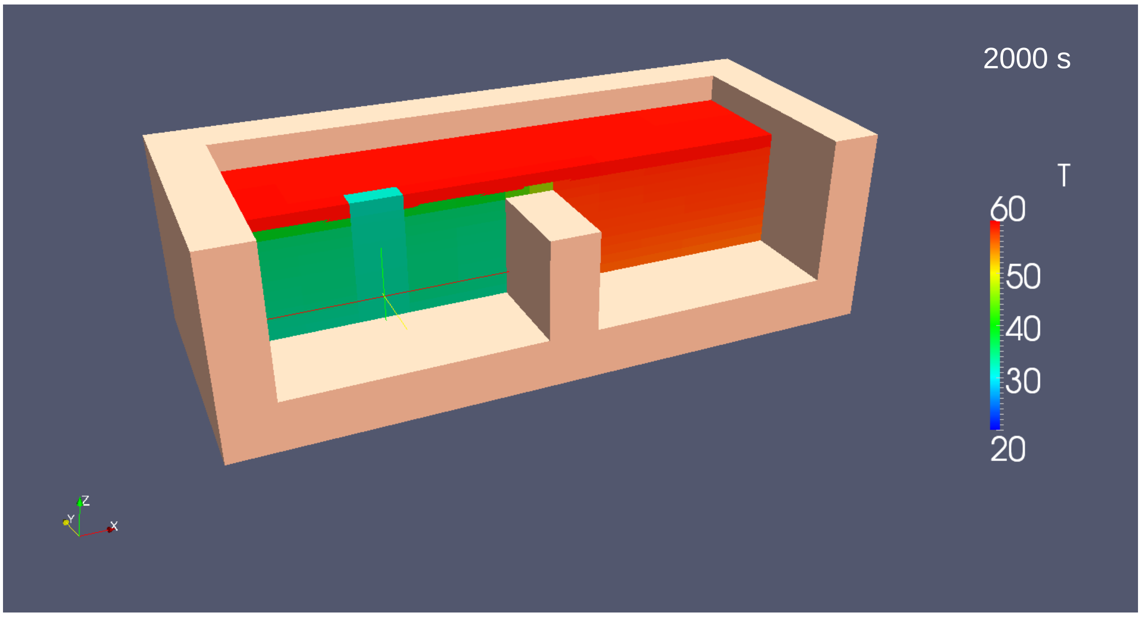


Abb. 2.42 Sumpftemperatur bei 2000 s

Ab 1000 s wird ein Pumpsystem gestartet. Hierbei wird unten aus dem Raum R1 Wasser entnommen (50 kg/s), gekühlt und oben in R1 eingespeist. Durch das Lumped-Parameter-Konzept mit mittleren Temperaturen sind beide Sümpfe stärker gekoppelt. Wie in Abb. 2.47 zu sehen ist, ist die Einlasstemperatur in der Stand-alone-Rechnung deutlich höher, so dass insgesamt die Kühlung stärker ist und damit langfristig mehr Energie aus dem System abgezogen wird.

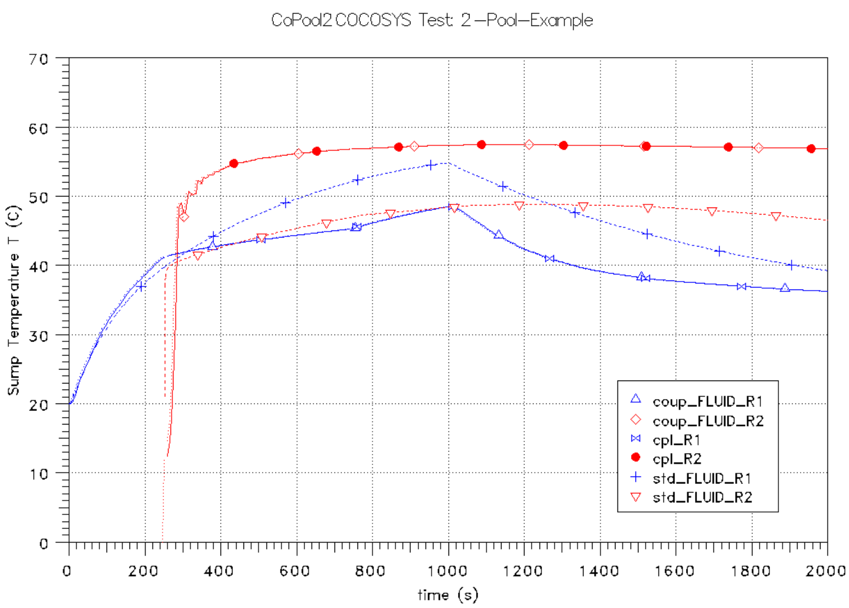


Abb. 2.43 Vergleich der mittleren Sumpftemperatur (gekoppelt, stand-alone)

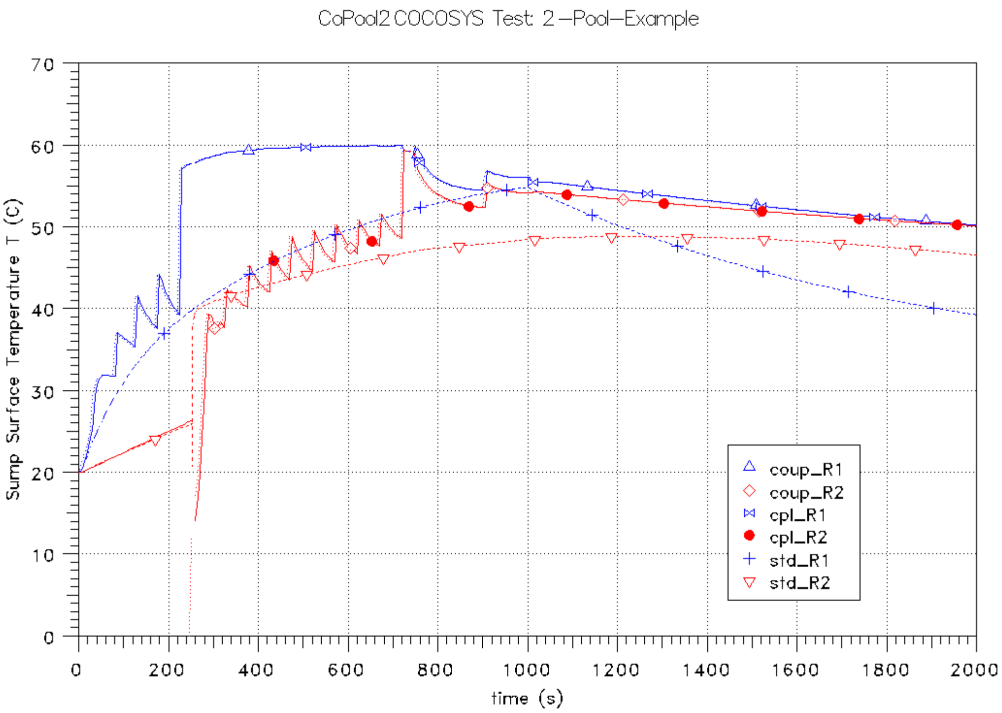


Abb. 2.44 Vergleich der Sumpfoberflächentemperatur (gekoppelt, stand-alone)

Abb. 2.45 zeigt den Massenstrom zwischen den Sümpfen. Sobald in R1 die Überlaufkante der Zwischenwand erreicht wird, strömen ca. 100 kg/s Wasser in den Sumpf von R2. Ist der untere Bereich von R2 aufgefüllt, steigt der Wasserstand in beiden Sümpfen gleichmäßig an, so dass sich der Massenstrom von R1 nach R2 auf 50 kg/s reduziert. Nach Beendigung der Einspeisung geht der Massenstrom gegen Null. CoPool berechnet für diesen Massenstrom Schwingungen, die in der Stand-alone-Rechnung nicht auftreten.

Sobald die Sumpfwasserstände angeglichen sind, gibt es aufgrund der Temperaturunterschiede, unterstützt durch die Kühlung in R1, eine Konvektionsströmung zwischen beiden Sümpfen. Dieser Zirkulationsmassenstrom kann in der Stand-alone-Rechnung nur vereinfacht simuliert werden. Das dort zugrunde liegende Modell berücksichtigt grob eine Zirkulationsströmung zwischen zwei Wasserpools mit gleichem Füllstand aufgrund von temperaturabhängigen Dichteunterschieden. Ein empirischer Vorfaktor kann hierbei z. B. an detaillierte CFD-Rechnungen angepasst werden. Aufgrund von Vergleichen mit CFX war zuvor ein Faktor von 2,5 als Vorfaktor zum Modell ermittelt. Um vergleichbare Ergebnisse zu erzielen, musste dieser Faktor auf 0,4 reduziert werden (Abb. 2.46).

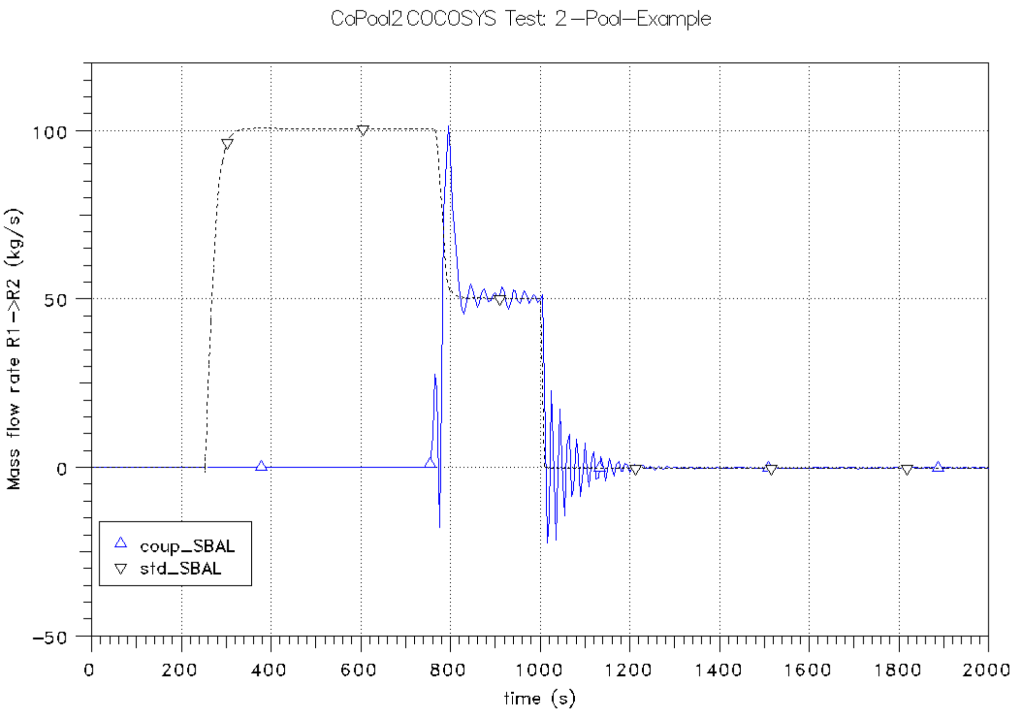


Abb. 2.45 Vergleich des Massenstroms von R1 nach R2 (gekoppelt, stand-alone)

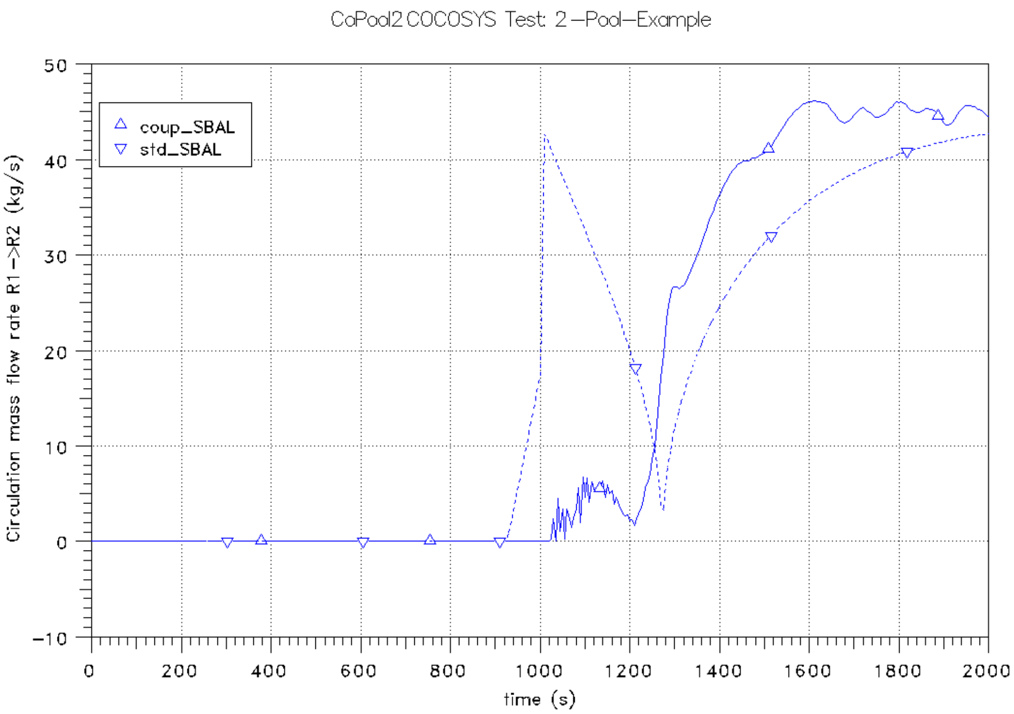


Abb. 2.46 Vergleich des Zirkulationsmassenstroms zwischen den Sümpfen (gekoppelt, stand-alone)

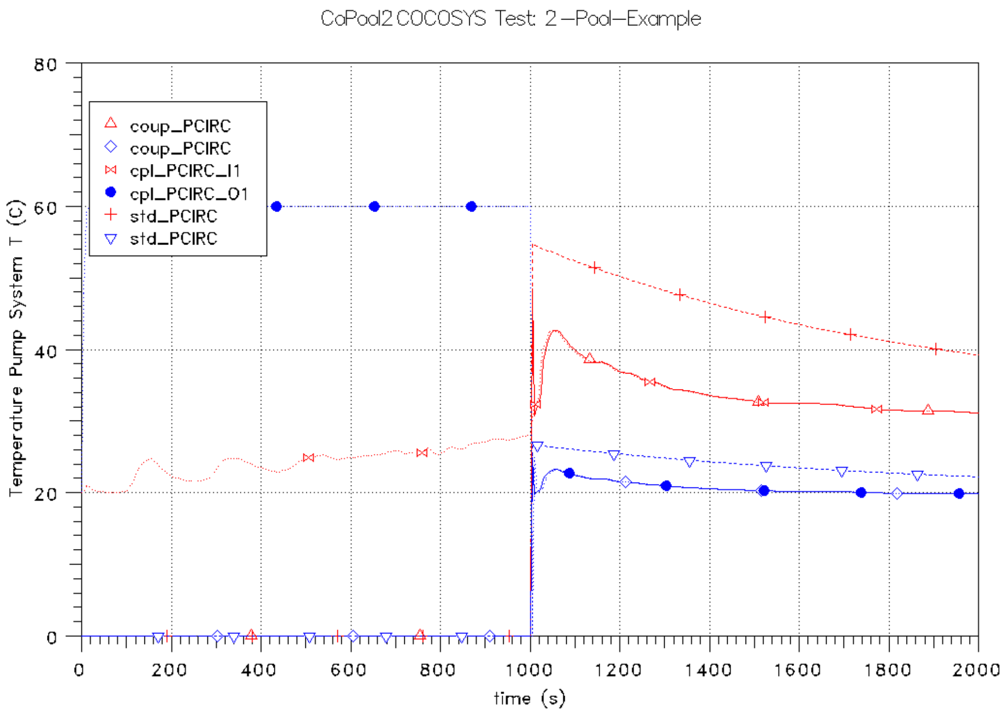


Abb. 2.47 Vergleich der Ein- und Auslasstemperaturen des Pumpsystems (gepunktet: Daten aus CoPool)

2.4.3.5 Fazit

Die Kopplung zwischen CoPool und COCOSYS ist weitgehend fertiggestellt. Benötigte Daten zu Sumpfvolumen, Sumpfverbindungen, Sumpf- und Wandoberflächen sowie äußeren Verbindungen werden zwischen beiden Modulen ausgetauscht. Anhand eines einfachen Testbeispiels wurden die Vorteile einer detaillierten Berechnung der Sumpftemperatur gezeigt. Die Arbeiten werden im Rahmen eines Nachfolgevorhabens weitergeführt.

2.4.4 Umstrukturierung des AFP-Moduls

In diesem Vorhaben wurden die Arbeiten zur Umstrukturierung des Hauptmoduls AFP fortgesetzt, konnten aber aufgrund des unerwartet hohen Aufwandes in Bezug auf die Kopplung mit CoPool nicht im vollen Umfang umgesetzt werden.

2.4.4.1 Hintergrund

Das Hauptmodul AFP in COCOSYS umfasst Module zur Simulation des Aerosolverhaltens (AERIKA), des Spaltprodukttransports (FIPHOST) und -verhaltens (FIPISO) sowie spezielle Module zur Simulation der Iodchemie (AIM) und des Pool-Scrubbing (SPARC). Die meisten Module und deren Konzepte basierten auf früheren eigenständigen Programmen, so dass die Modelle und Konzepte nicht vollständig aufeinander abgestimmt sind. Dies gilt für die Bereitstellung von Eingabedaten, für die verwendete Modellierung (z. B. Abwaschen) sowie für die Interpretation der Ergebnisse.

Das neue Konzept basiert im Wesentlichen auf einer Baumstruktur der verschiedenen Spezies /SPE 12/ und einer gemeinsamen Bilanzierung der verschiedenen Ebenen: „Compositions“ (z. B. Aerosole), chemische Spezies, Elemente und Nuklide). Mit den im vorherigen Vorhaben RS1185 entwickelten Operatoren ist eine konsistente Bilanzierung gewährleistet und relativ einfach zu implementieren. Allerdings ist zu beachten, dass die konzeptionellen Vorgehensweisen im alten und im umstrukturierten AFP-Modul teilweise unterschiedlich sind und daher neue Verfahren entwickelt werden mussten, z. B. bei der Berechnung der Ablagerung.

Im früheren AFP wird bezüglich der Ablagerung zwischen Decken-, Seiten- und Bodenflächen unterschieden. Im neuen AFP soll die Ablagerung für jede einzelne Wandoberfläche separat betrachtet werden können, da sich die thermohydraulischen Randbedingungen teilweise erheblich unterscheiden. Dadurch erhöht sich die Anzahl der Aerosolkoeffizienten entsprechend, so dass im Grunde auch aerosolspezifische Routinen entsprechend umstrukturiert und erweitert werden mussten.

Die Routinen und Modelle zur Berechnung der Volumenkondensation mit der sogenannten MGA-Methode sind sehr komplex. Um eine fehlerfreie Umstellung überprüfen zu können, wurden spezifische Tests durchgeführt, in denen eine zufällige Aerosolkonzentration und zufällige thermodynamische Randbedingungen generiert wurden und überprüft wurde, ob die Ergebnisse exakt übereinstimmen. Dies ist mit einem entsprechend höheren Aufwand verbunden.

2.4.4.2 Berechnung der Ablagerung

In Bezug auf die Ablagerung von Aerosolen werden Ablagerungsgeschwindigkeiten v (m/s) aufgrund von

- Sedimentation (v_{sed}, durch Gravitation)
- diffuser Ablagerung (v_{diff}, Brownsche Bewegung)
- Thermophorese (v_{tph}, Ablagerung aufgrund eines Temperaturgradienten an der Wand)
- Diffusiophorese (v_{dph}, Ablagerung aufgrund einer Wandkondensation)

unterschieden. Die gesamte Ablagerung ist die Summe der einzelnen Prozesse.

$$R = \sum_{i,k,l} \frac{A_i}{V} \left(\sin(\alpha) v_{sed} + v_{dif} + v_{tph} + v_{dph} \right) \cdot c_{k,l} \qquad (2.33)$$

Wobei A_i die Oberfläche der einzelnen Wände und V das freie Gasvolumen ist. Wie oben schon angedeutet, wird in dem neuen AFP jede Wand einzeln betrachtet. Die Sedimentation hängt dabei von der Ausrichtung der Wand ab, welche nun per Eingabe vorgegeben werden kann. Ebenso wird die Änderung der Ablagerungsflächen aufgrund des aktuellen Wasserstandes in der Zone (Fluten von Zonen) berücksichtigt.

Die einzelnen Gleichungen zur Aerosolablagerung wurden nicht verändert und sind in dem COCOSYS-Referenz-Handbuch beschrieben.

Ein wesentlicher Unterschied zwischen altem und neuem AFP-Hauptmodul ist, dass die Bilanzierung außerhalb der Integration des Aerosolverhaltens explizit nachgerechnet wird. Dabei ist zu beachten, dass sich die Zusammensetzung der betrachteten Spezies ε sich ändern kann (Abb. 2.48).

Für die luftgetragenen Aerosole y und die abgelagerten Aerosole gelten die Bilanzgleichungen vor und nach dem Zeitschritt:

$$\begin{aligned} & y_1 + \sum \Delta y_d = y_0 + \Delta y + \sum \Delta y_{r\,i} \\ & z_{1_i} + \Delta y_{r_i} = z_{0_i} + \Delta y_{d\,i} \qquad \forall i \end{aligned} \qquad (2.35)$$

Die entsprechenden Gleichungen für eine Spezies sind dann:

$$\varepsilon_1 + \sum \Delta\varepsilon_{d_i} = \varepsilon_0 + \Delta\varepsilon + \sum \Delta\varepsilon_{r_i}$$
$$\delta_{1_i} + \Delta\varepsilon_{r_i} = \delta_{0_i} + \Delta\varepsilon_{d\,i} \qquad \forall i \tag{2.36}$$

mit:

y_0, y_1	luftgetragene Aerosolmasse vor und nach dem Zeitschritt
z_0, z_1	abgelagerte Aerosolmasse vor und nach dem Zeitschritt
Δy	Aerosoltransport in dem betrachteten Zeitschritt
Δy_d	„neu" abgelagerte Aerosolmasse in dem betrachteten Zeitschritt
Δy_r	resuspendierte Aerosolmasse in dem betrachteten Zeitschritt
ε_0, ε_1	luftgetragene Speziesmasse vor und nach dem Zeitschritt
δ_0, δ_1	abgelagerte Speziesmasse vor und nach dem Zeitschritt
$\Delta\varepsilon$	Speziestransport in dem betrachteten Zeitschritt
$\Delta\varepsilon_d$	„neu" abgelagerte Speziesmasse in dem betrachteten Zeitschritt
$\Delta\varepsilon_r$	resuspendierte Speziesmasse in dem betrachteten Zeitschritt

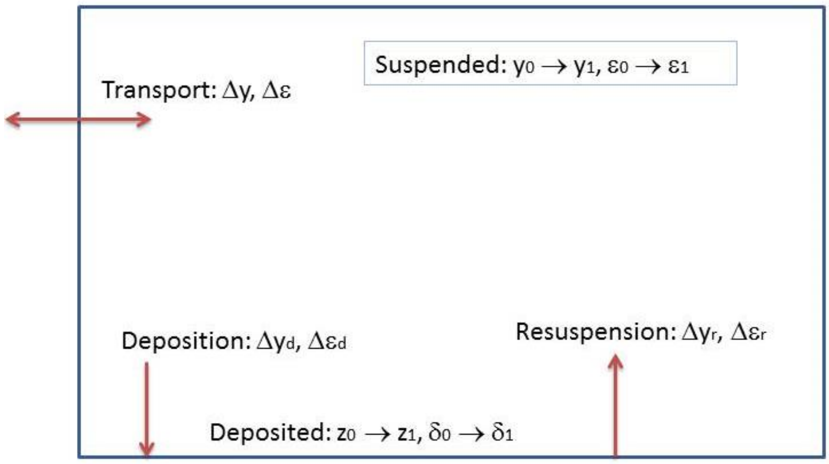


Abb. 2.48 Verknüpfung zwischen Aerosolrechnung und Bilanzierung der Spezies

In dem alten Konzept wird angenommen, dass das Verhältnis $f = \frac{\varepsilon}{y}$ zwischen Speziesmasse ε (hier: Element in FIPHOST) und Aerosolmasse y konstant ist, und es wird eine mittlere Rate

$$r = \frac{y_d}{\frac{1}{2}(y_0 + y_1)} \tag{2.37}$$

zur Berechnung der Ablagerung der Spezies verwendet. Die Ablagerungsrate wird über den Zeitschritt als konstant angenommen.

In dem neuen Konzept kann sich die Zusammensetzung der Spezies ändern. In Anlehnung an dem alten Konzept wird nun folgende Näherungsgleichung verwendet:

$$\Delta\varepsilon_{d\,i} \approx \frac{1}{2}\left(\varepsilon_0 + \varepsilon_1\right)\cdot \frac{y_{d_i}}{\frac{1}{2}\left(y_0 + y_1\right)} = \left(\varepsilon_0 + \varepsilon_1\right)\cdot d_i \tag{2.38}$$

Eine entsprechende Gleichung kann für die Resuspension aufgestellt werden:

$$\Delta\varepsilon_{r\,i} \approx \frac{1}{2}\left(\delta_{0i} + \delta_{1i}\right)\cdot \frac{y_{r_i}}{\frac{1}{2}\left(z_{0i} + z_{1i}\right)} = \left(\delta_{0i} + \delta_{1i}\right)\cdot r_i \tag{2.39}$$

Nach einigen Umformungen erhält man die resultierenden Gleichungen für die luftgetragene (ε_1) und die abgelagerten Speziesmassen (δ_{1_i}):

$$\varepsilon_1 = \frac{\left(1 - \sum \frac{d_i}{1+r_i}\right)\varepsilon_0 + \Delta\varepsilon + \sum \frac{2r_i}{1+r_i}\cdot\delta_{0_i}}{1 + \sum \frac{d_i}{1+r_i}} \tag{2.40}$$

$$\delta_{1_i} = \frac{d_i}{1+r_i}\left(\frac{2}{1+\sum\frac{d_i}{1+r_i}}\right)\cdot\varepsilon_0 + \frac{\frac{d_i}{1+r_i}}{1+\sum\frac{d_i}{1+r_i}}\Delta\varepsilon + \left(\frac{1-r_i}{1+r_i} + \frac{d_i}{1+r_i}\,\frac{\sum\frac{2r_i}{1+r_i}}{1+\sum\frac{d_i}{1+r_i}}\right)\cdot\delta_{0_i} \qquad \forall i \tag{2.41}$$

In dem aktuellen Stand der Programmierung wird die Resuspension von Aerosolen noch nicht betrachtet.

2.4.4.3 Testrechnungen in Bezug auf Ablagerung von Aerosolen

Zur Überprüfung des neuen AFP-Hauptmoduls wurde eine Reihe von Testrechnungen durchgeführt. Beispielhaft werden nachfolgend ausgewählte Ergebnisse dargestellt.

Um die separaten Effekte vergleichen zu können, wurde ein einfaches Beispiel mit einer Zone verwendet. In diesem Raum mit einem Volumen von 1000 m^3 wurde eine sehr hohe Aerosolkonzentration von 0,1 kg/m^3 vorgegeben.

Weiterhin wurde das 4-Raum-Testbeispiel aus /SPE 12/ verwendet (Abb. 2.49). In dem hier dargestellten Test mit vier verbundenen Räumen mit jeweils 1000 m^3 wurden Aerosole und Spaltprodukte in dem unteren Raum R1 eingespeist. Dabei wurde angenommen, dass die eingespeisten Aerosole sich alle in einer Größenklasse befinden, also monodispers verteilt sind. Zur Simulation der Ablagerung wurde eine Bodenstruktur (*S1B*) in R1, eine Seitenwand (*S1S*) zwischen R1 und R2 und eine Decke (*S1C*) zwischen R1 und R3 definiert.

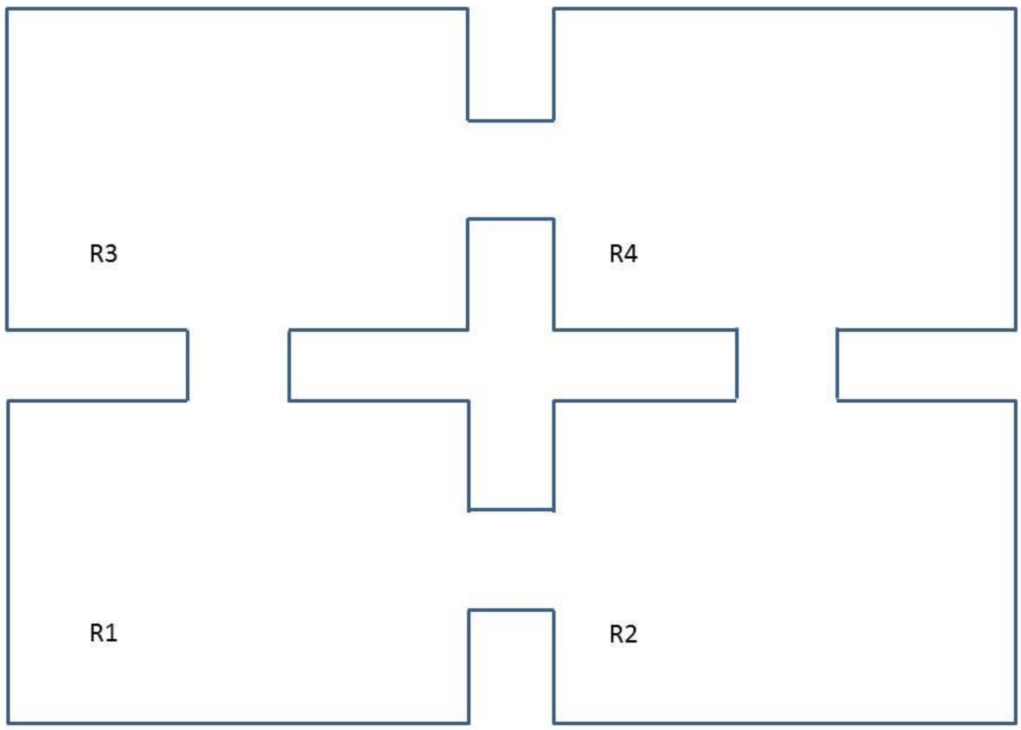


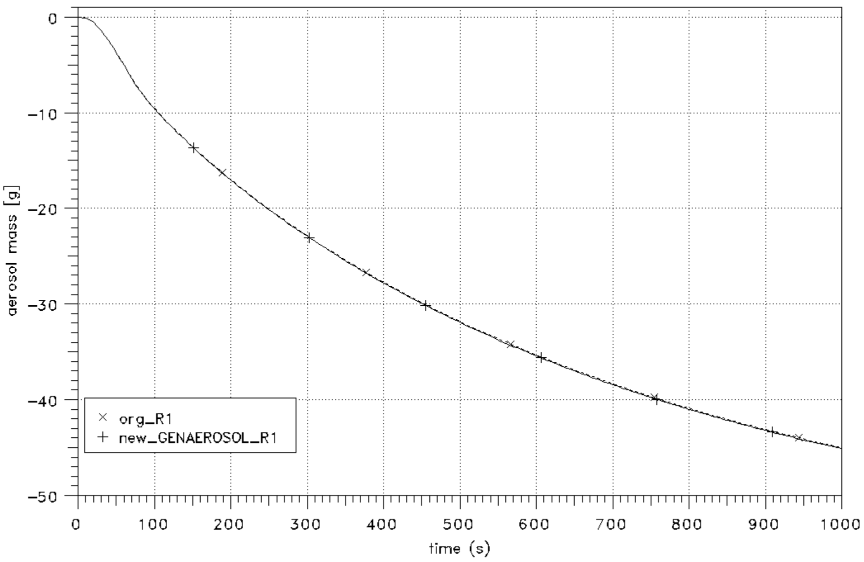
Abb. 2.49 Nodalisierung des Testbeispiels

Im ursprünglichen AFP müssen die Aerosolmenge (AECOMP) und das Element (Te) getrennt definiert werden. Dies ist in dem neuen Konzept nicht notwendig. Mit der Vorgabe des Elements Te werden die zugehörigen Aerosolmengen entsprechend definiert. Die Eingabe sieht dabei wie folgt aus:

```
----- AE_INITIAL
@      STYPE   SPECIES   PART MASS   DISTYPE   DIAM   SIGMA
       CHEMICAL  Te       1    10.   LOG_MASS  1.D-6   1.2
```

Vergleich der Ablagerung an einer Seitenwand – Einraumrechnung

Anhand verschiedener Testrechnungen wurde überprüft, dass die Ergebnisse beider Versionen übereinstimmen. Im dem hier dargestellten Vergleich wird die Ablagerung an einer Seitenwand unter kondensierenden Bedingungen dargestellt. Die Ergebnisse der ursprünglichen AFP-Version werden dabei gestrichelt dargestellt. Die des neuen AFP-Hauptmoduls sind mit durchgezogenen Linien dargestellt. Bezüglich der luftgetragenen Massen wird die Änderung von der Anfangsmasse dargestellt (Abb. 2.50).



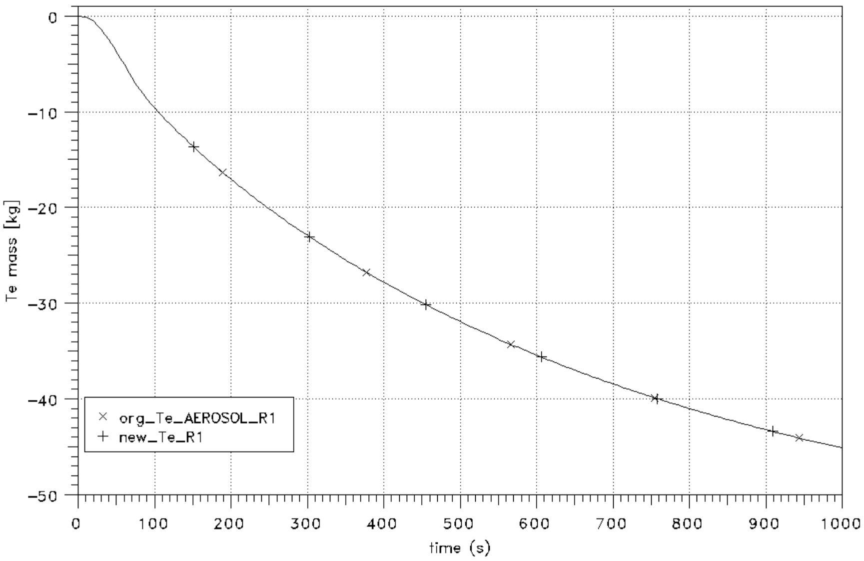


Abb. 2.50 Vergleich der luftgetragenen Aerosolmasse anhand einer Einraumrechnung

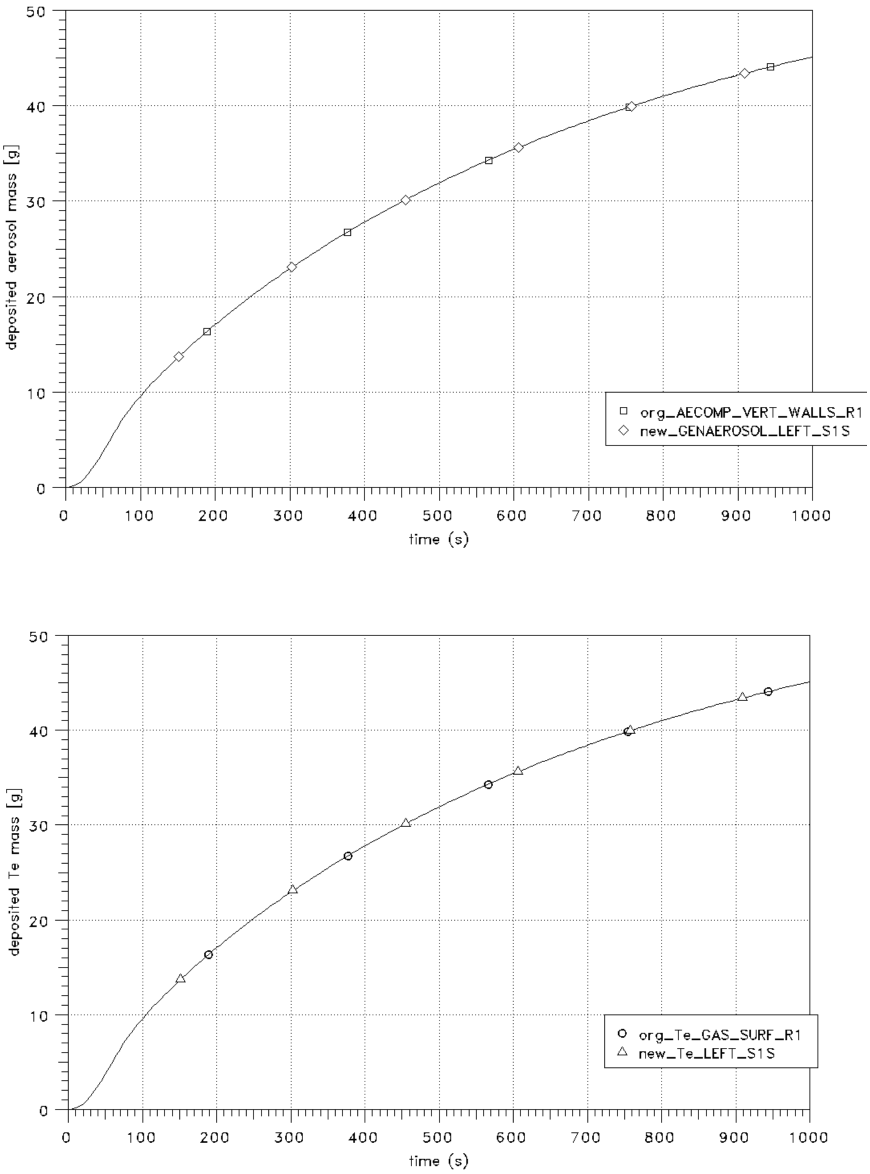


Abb. 2.51 Vergleich der Ablagerung an einer Seitenwand anhand einer Einraumrechnung

Ein Vergleich der Aerosolgrößenverteilung zum Zeitpunkt 15 s und 900 s wird in Abb. 2.52 gezeigt. Insgesamt wird eine sehr gute Übereinstimmung erzielt, so dass die Implementation der Ablagerungsmodelle in dem neuen AFP-Hauptmodul erfolgreich abgeschlossen wurde.

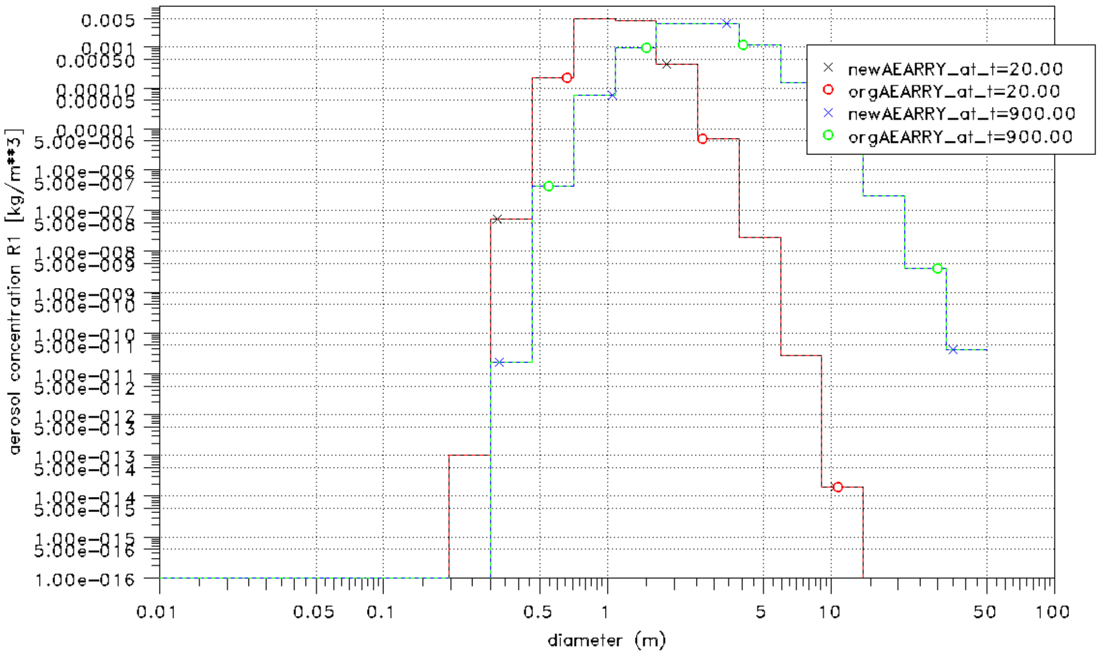


Abb. 2.52 Vergleich der Aerosolspektren bei 15 s und 900 s

Vergleich anhand einer 4-Raum-Rechnung

Die Dampfeinspeisung in R1 sowie die Verteilung des Dampfes führen zu einer Wandkondensation, welche in Abb. 2.53 dargestellt ist. Abb. 2.54 und Abb. 2.55 zeigen einen Vergleich der luftgetragenen Aerosol- und Elementmassen. Die Ergebnisse beider AFP-Hauptmodule (*org, new*) stimmen überein. In diesem Zeitbereich ist der Einfluss der Ablagerung allerdings noch sehr gering. In Abb. 2.56 wird der Vergleich der Aerosolablagerung dargestellt. Die Ergebnisse für Decke und Seitenwände (blaue, rote und pinke Kurven) stimmen sehr gut überein. Die Ablagerung auf dem Boden wird im neuen AFP „abgeschaltet“, sobald in der Zone R1 bzw. R3 eine Sumpfzone generiert wird (Abb. 2.58). Die Ablagerung im Sumpf sowie der Aerosoltransport in der Sumpfphase sind im neuen Modul noch nicht implementiert. In FIPHOST wird bzgl. der Ablagerung in der Gasphase nicht zwischen Decke und Seitenwand unterschieden. Daher wurden für den Vergleich die Flächen S1C und S1S zusammengefasst. Auch für das Element Tellur (Te) ist die Übereinstimmung sehr gut. Bezüglich der Ablagerung im Sumpf gilt entsprechendes wie für die Aerosole.

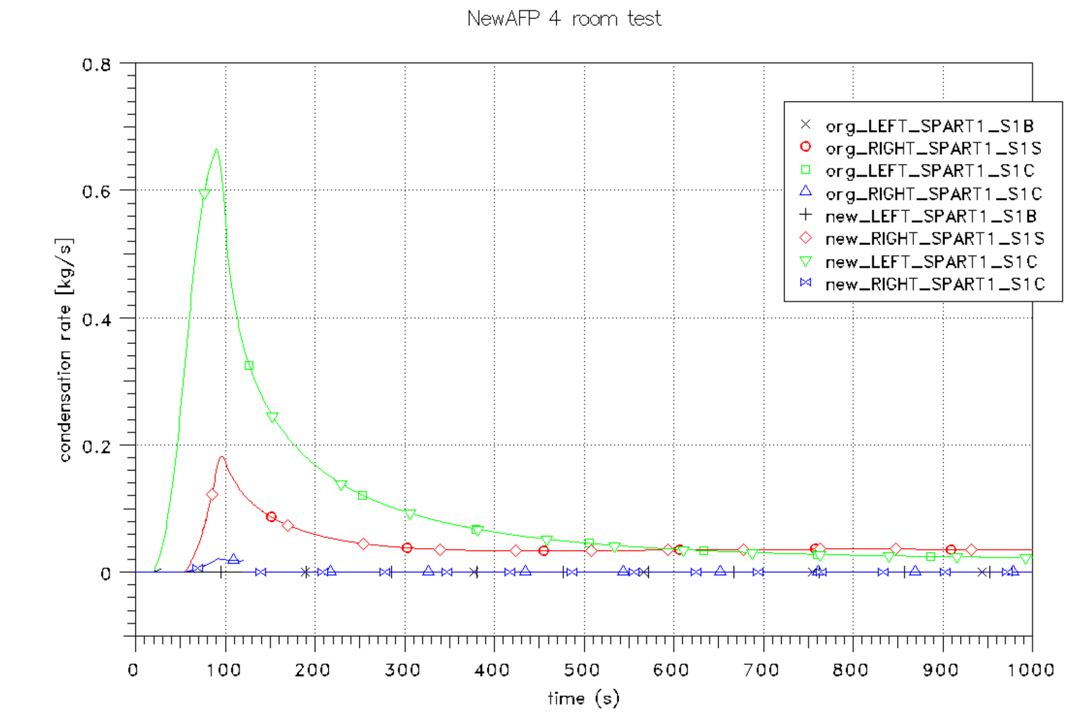


Abb. 2.53 Vergleich der Wandkondensation

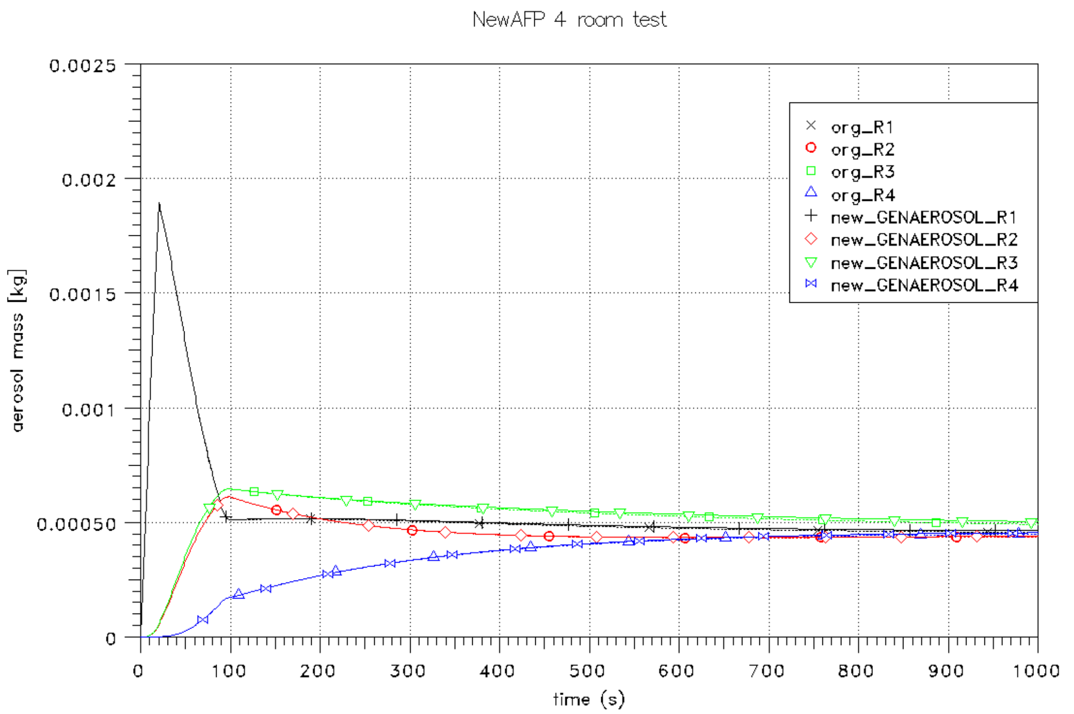


Abb. 2.54 Vergleich der Aerosolmassen

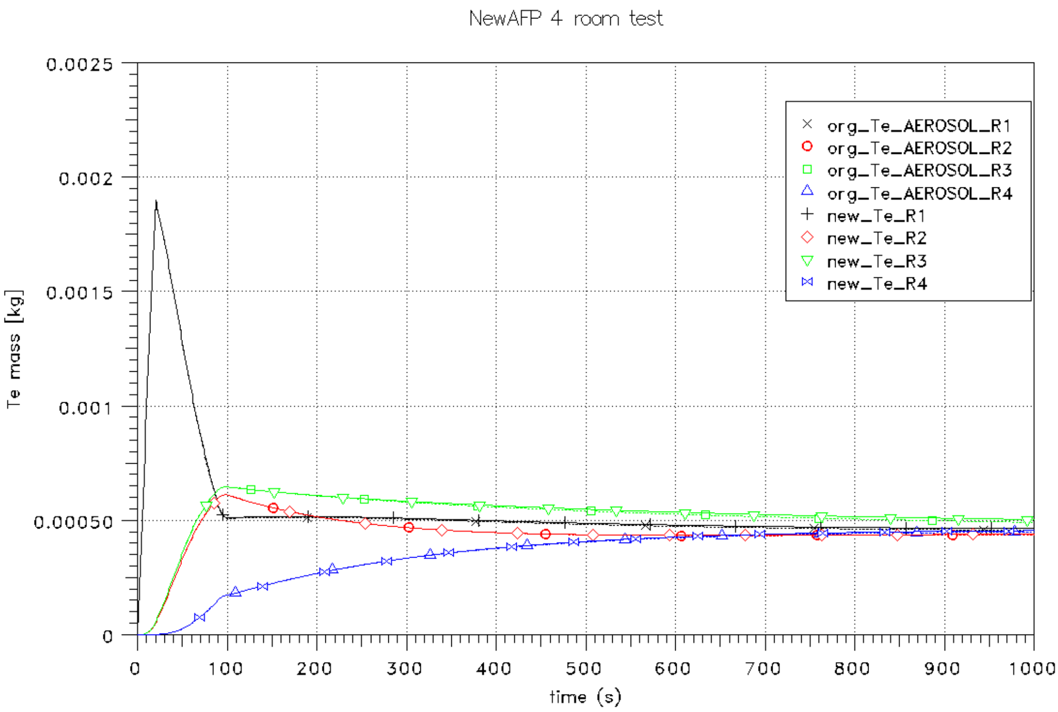


Abb. 2.55 Vergleich der Tellurmasse

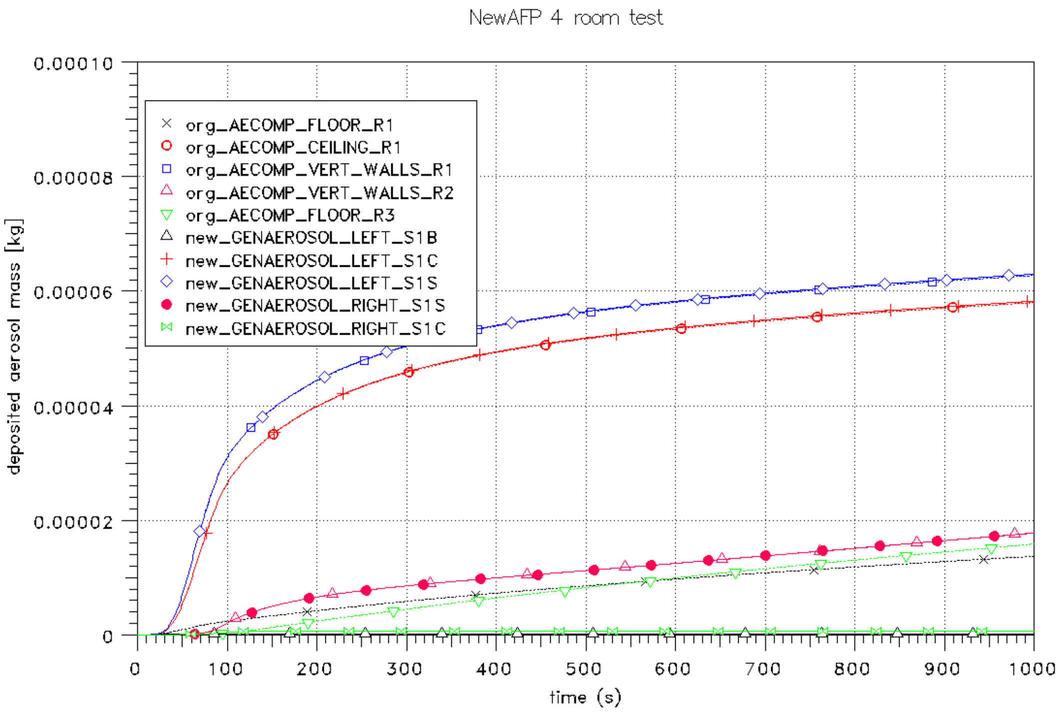


Abb. 2.56 Vergleich der abgelagerten Aerosolmassen

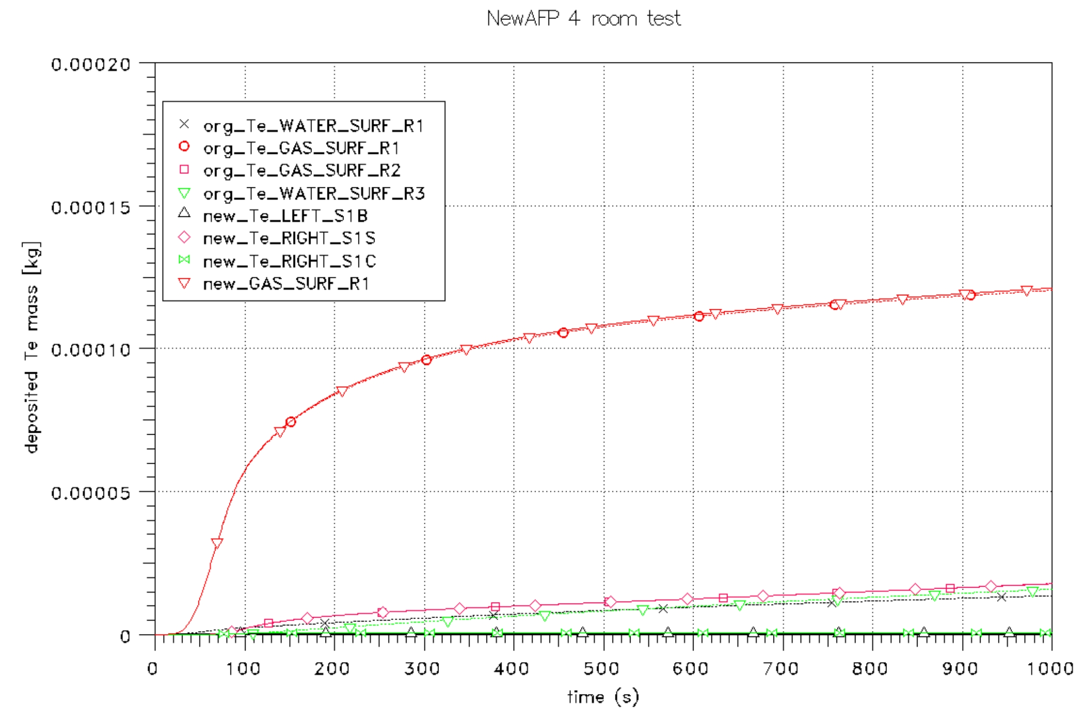


Abb. 2.57 Vergleich der abgelagerten Tellurmasse

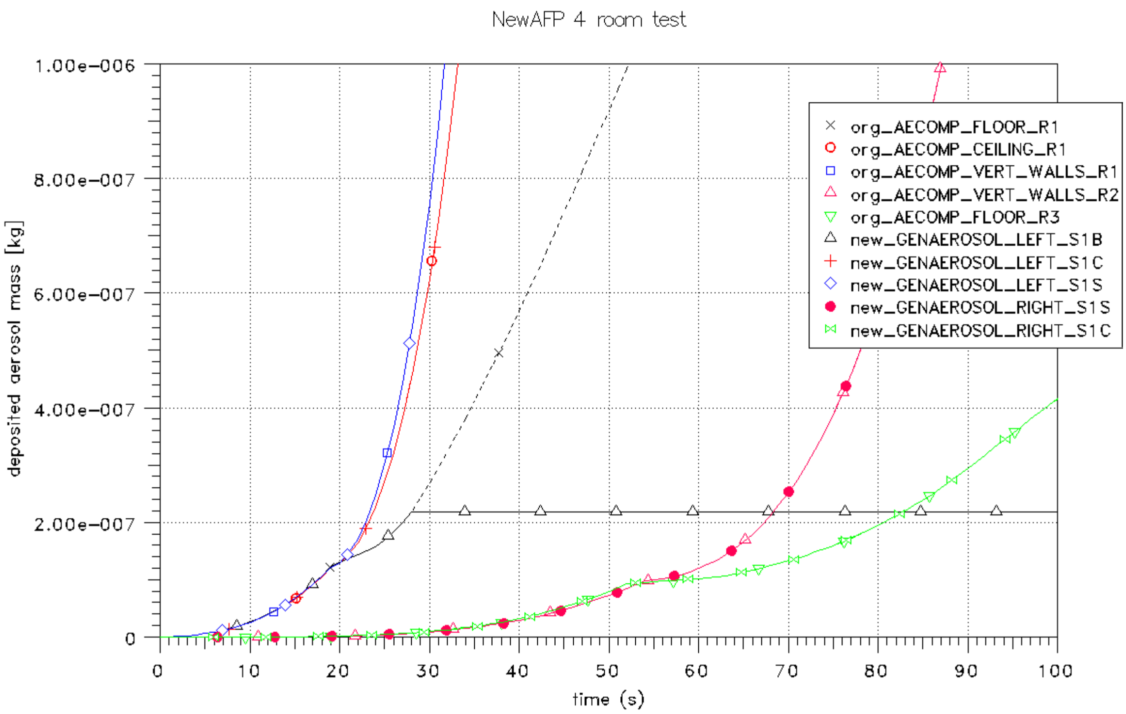


Abb. 2.58 Vergleich der Aerosolablagerung (Ausschnitt)

2.4.4.4 Berechnung der Volumenkondensation

Die Berechnung der Volumenkondensation an Aerosolen wird in AFP mit der sogenannten Moving-Grid-Analysis (MGA) -Methode berechnet /GEL 90/. Diese Methode umgeht die bei Fixed-Grid-Modellen gegebene „Steifheit“ des Gleichungssystems und reduziert die numerische Diffusion zwischen den vorhandenen Größenklassen. Somit sind die Lösungen stabiler und ein Verschmieren der Aerosolmasse über verschiedene Größenklassen wird reduziert (Abb. 2.59).

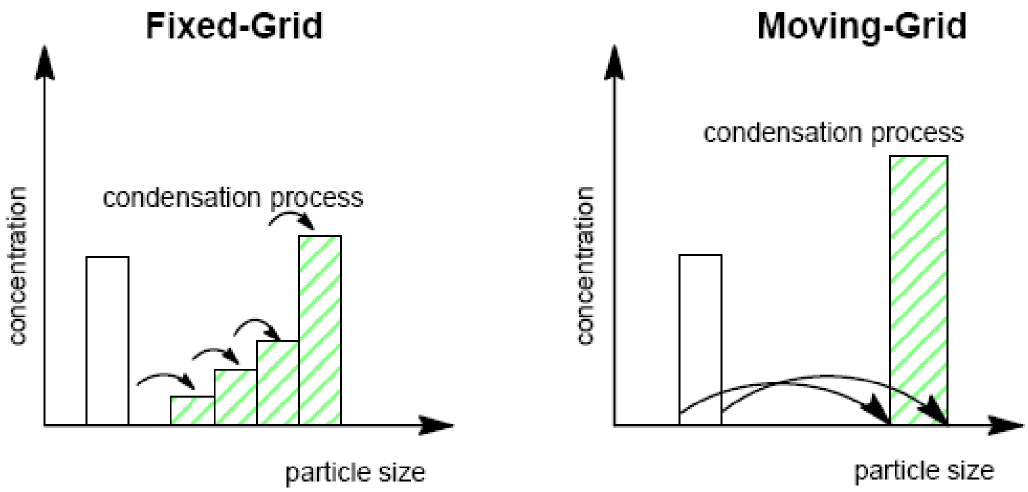


Abb. 2.59 Schematischer Vergleich der Fixed-Grid und der MGA-Methode (Während bei der Fixed-Grid-Methode die vergrößerten Partikel in Klassen mit größeren Durchmessern aber festen Klassengrenzen eingeordnet werden, werden bei der MGA-Methode die Klassengrenzen angehoben.)

Die Partikelwachstums- bzw. -schrumpfungsrate ist im Modell MGA durch die Mason-Gleichung in der folgenden Form gegeben /GEL 90/:

$$\frac{dm}{dt} = \frac{2\pi D_p \left\{ \frac{c_D}{c_{D,s}} - a_W e^{\frac{4\sigma M_W}{RT\rho_W D_p}} \right\}}{\frac{1}{c_{D,s} D'} + \frac{\Delta h}{\lambda_{Atm} \cdot T} \left[\frac{\Delta H M_W}{RT} - 1 \right]} \quad (2.42)$$

mit:

dm/dt	Zeitableitung der Partikelmasse (kg/s)
D_p	Partikeldurchmesser (m)
a_W	Chemische Aktivität der Lösung

σ	Oberflächenspannung des Wassers (N/m)
R	Universelle Gaskonstante (kJ/(kmol K))
ρ_W	Dichte des Wassers (kg/m^3)
M_W	Molekulargewicht des Wassers (kg/kmol)
λ	Thermische Wärmeleitfähigkeit der Atmosphäre (W/mK)
D'	Diffusionskoeffizient für Wasserdampf (m^2/s)
Δh	Latente Wärme des Wassers (J/kg)
c_D	Dampfkonzentration (kg/m^3)
$c_{D,s}$	Sättigungsdampfkonzentration (kg/m^3)

Der Hygroskopieeffekt wird in der Gleichung durch die chemische Aktivität der Lösung, die durch den van't Hoff-Faktor bestimmt ist, beschrieben. Er entspricht der Anzahl der Ionen, die ein Molekül des Salzes in idealer Lösung dissoziiert. Für wasserunlösliche Stoffe ist $a_w = 0$. Im MGA-Modell wird angenommen, dass stets eine ideale Lösung vorliegt, in der die chemische Aktivität mit steigendem molaren Anteil des Wassers in einem Tröpfchen abnimmt:

$$a_W = 1 - \frac{\sum_k i_k n_k}{n_W + \sum_k i_k n_k} \tag{2.43}$$

a_W	Chemische Aktivität des Wassers
i	Van't–Hoff Faktor
n	Molzahl
k	Lösliche Aerosolkomponenten (Salze)
W	Wasser

Eine genaue Beschreibung des MGA-Modells findet man in /HON 96/. Ein Überblick der vorhandenen Unterprogramme ist in Abb. 2.60 dargestellt. Die gelb dargestellten Routinen wurden bereits umgestellt. Dagegen wurden die beiden grau dargestellten Routinen noch nicht vollständig umgesetzt.

Die Routine **FRSTEQ** enthält ein einfaches Gleichgewichtsmodell auf Basis der Massen- und Energieerhaltung und bestimmt die Temperatur, Dampfkonzentration und die Gesamtkonzentration des Nebels. Das luftgetragene Wasser wird dann auf alle Größenklassen verteilt. Dann wird die Gleichgewichts-Aerosolgrößenverteilung bestimmt.

Die so bestimmte Gleichgewichts-Dampfkonzentration wird als erste Näherung für ein genaueres Gleichgewichtsmodell in der Routine **EQLIB** verwendet. Für diejenigen Größenklassen, in denen ein stabiles Gleichgewicht möglich ist, wird die Wasserbeladung iterativ korrigiert, wobei die gesamte Wasserbilanz und die Gleichgewichtsdampfkonzentration berücksichtigt werden.

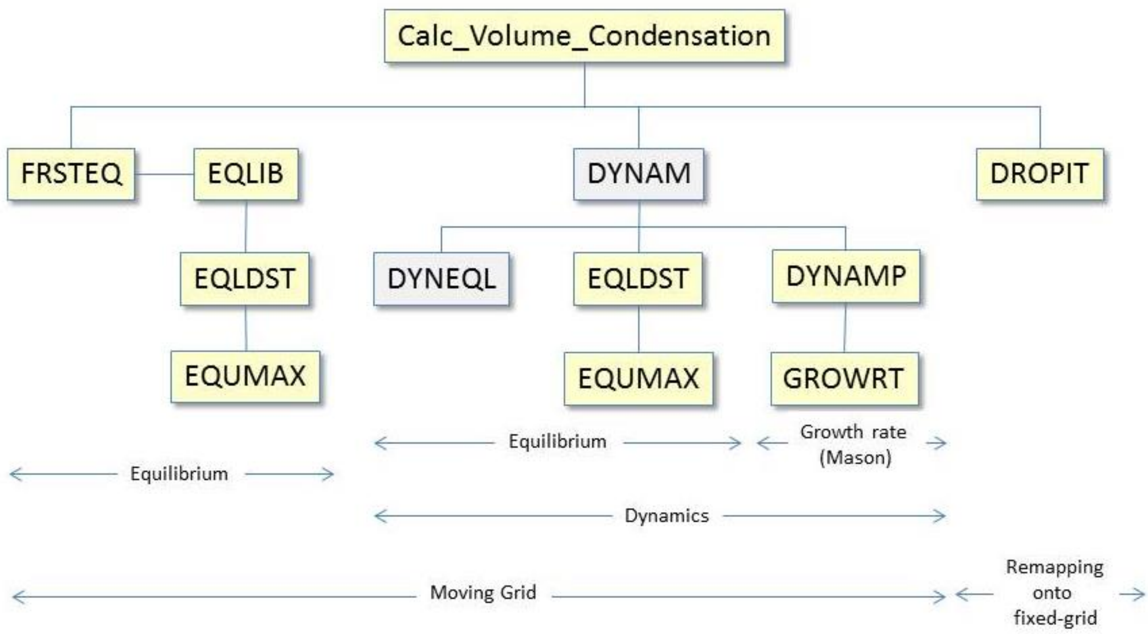


Abb. 2.60 Übersicht der Unterprogramme zur Berechnung der Volumenkondensation

Die Routine **DYNAM** enthält die dynamische Modellierung der Volumenkondensation an Aerosolen. Der globale Aerosolzeitschritt wird dabei in gleiche Teile geteilt. Das Partikelwachstum bzw. die Partikelschrumpfung wird in der Routine **GROWRT** berechnet. Die Wassermasse auf den Aerosolen in jeder Größenklasse wird in der Routine **DYNAMP** numerisch integriert, wobei die Größenklassen entsprechend der Größenänderung der Partikel verschoben werden (vgl. schematische Skizze in Abb. 2.59, rechts).

In der Routine **DROPIT** werden die „verschobenen“ Größenklassen wieder auf die „festen“ Größenklassen umgerechnet.

Meistens wird in den COCOSYS-Rechnungen nur der Gleichgewichtsansatz (linker Ast in Abb. 2.60) verwendet. Dieser ist bereits in der umstrukturierten AFP-Version vorhanden. Im folgenden Kapitel werden einfache Testrechnungen dargestellt.

2.4.4.5 Testrechnungen in Bezug auf Volumenkondensation

Um die Umstellung des AFP-Hauptmoduls bezüglich der Volumenkondensation zu überprüfen, wurden einfache Testrechnungen in Form von Einraumrechnungen durchgeführt und die einzelnen Phänomene möglichst separiert. Betrachtet wird dabei ein Raum von 10 m^3 mit einer Seitenwand (seitliche Ablagerung durch Thermophorese und Diffusiophorese) und einer kontinuierlichen Dampfeinspeisung. Bis 30 s wird ein CsOH-Aerosol eingespeist (Gesamtmenge 0,025 g). Wie die folgenden Abb. 2.61 bis Abb. 2.67 zeigen ist die Übereinstimmung sehr gut. Langzeitig stellt sich in diesem Beispiel aufgrund der konstanten Dampfeinspeisung eine relativ konstante Volumenkondensationsrate (Abb. 2.61) ein. Dadurch ergibt sich auch eine konstante Nebelkonzentration (Abb. 2.63) und ein linearer Anstieg der abgelagerten Nebelmasse (Abb. 2.65).

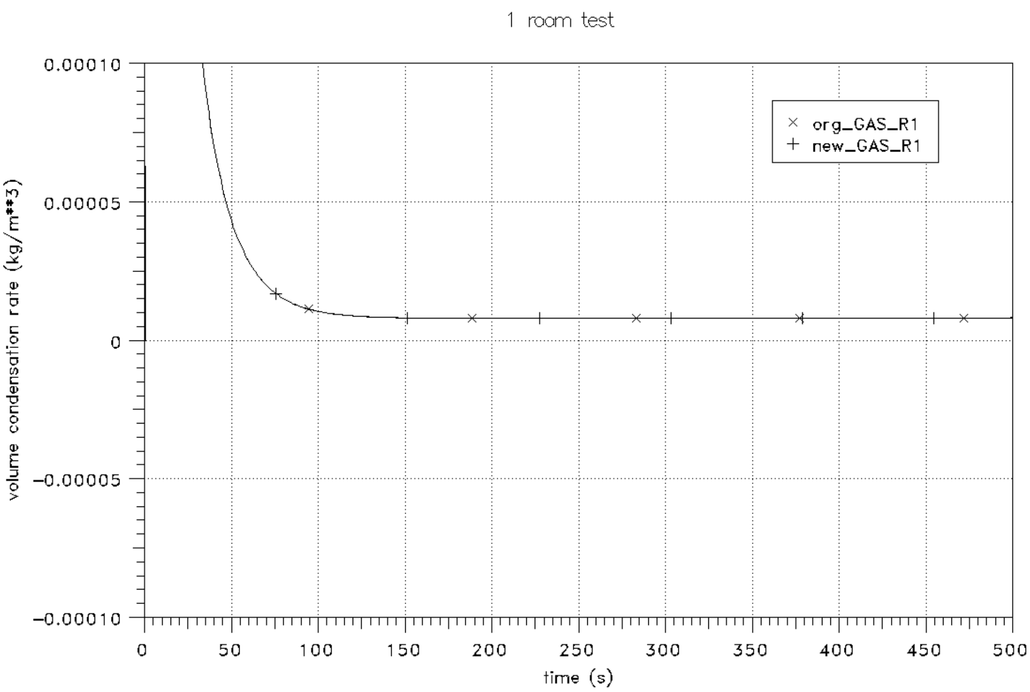


Abb. 2.61 Vergleich der Volumenkondensationsrate

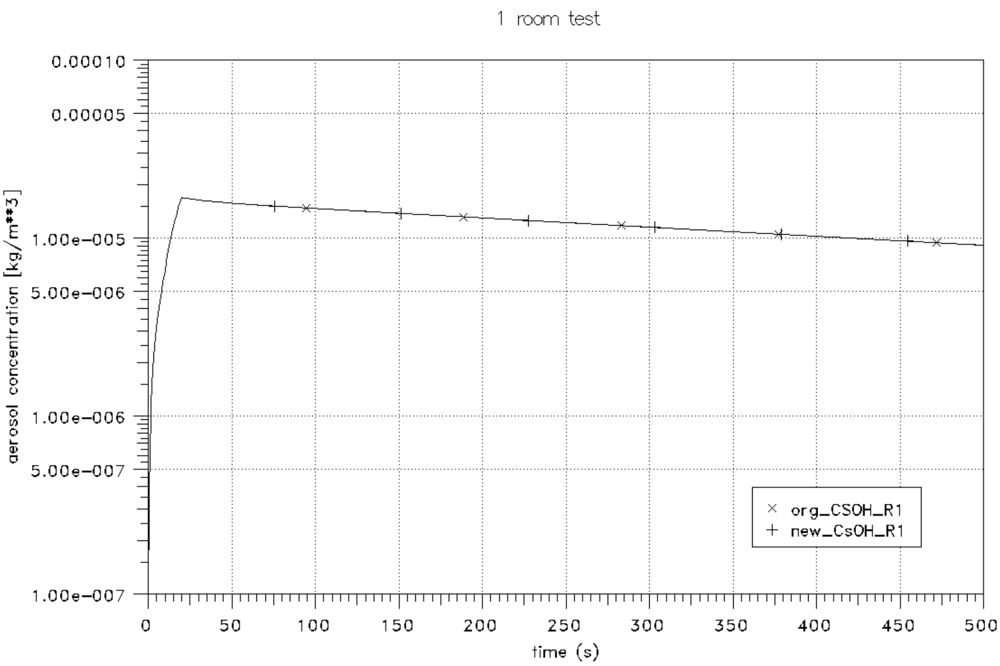


Abb. 2.62 Vergleich der CsOH-Aerosolkonzentration

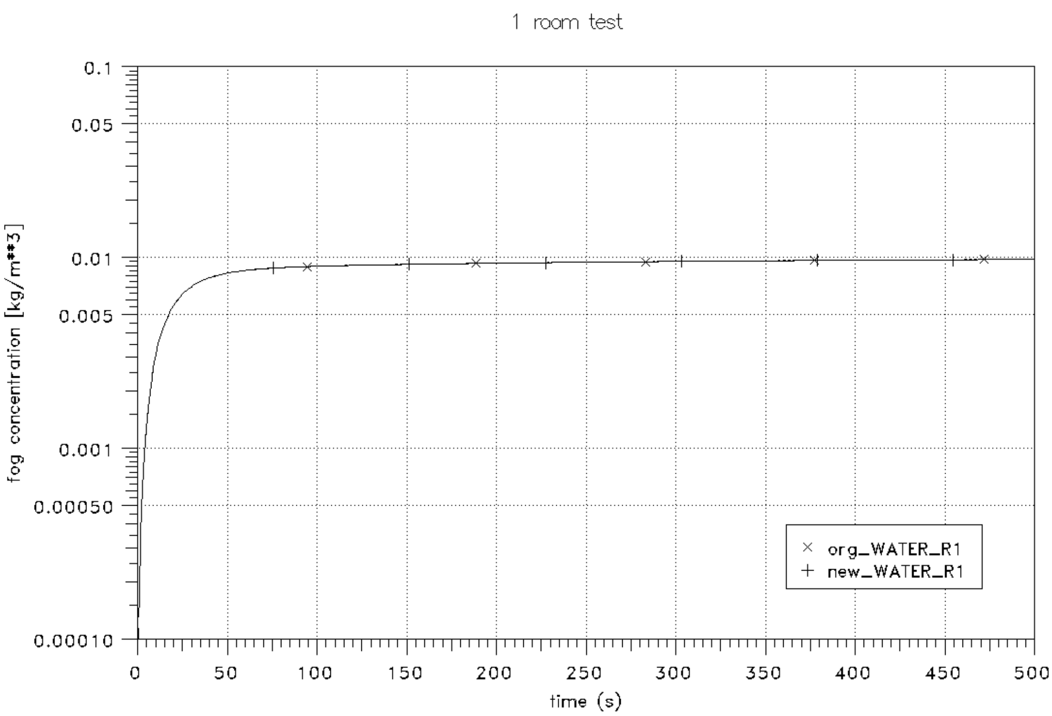


Abb. 2.63 Vergleich der Nebelkonzentration

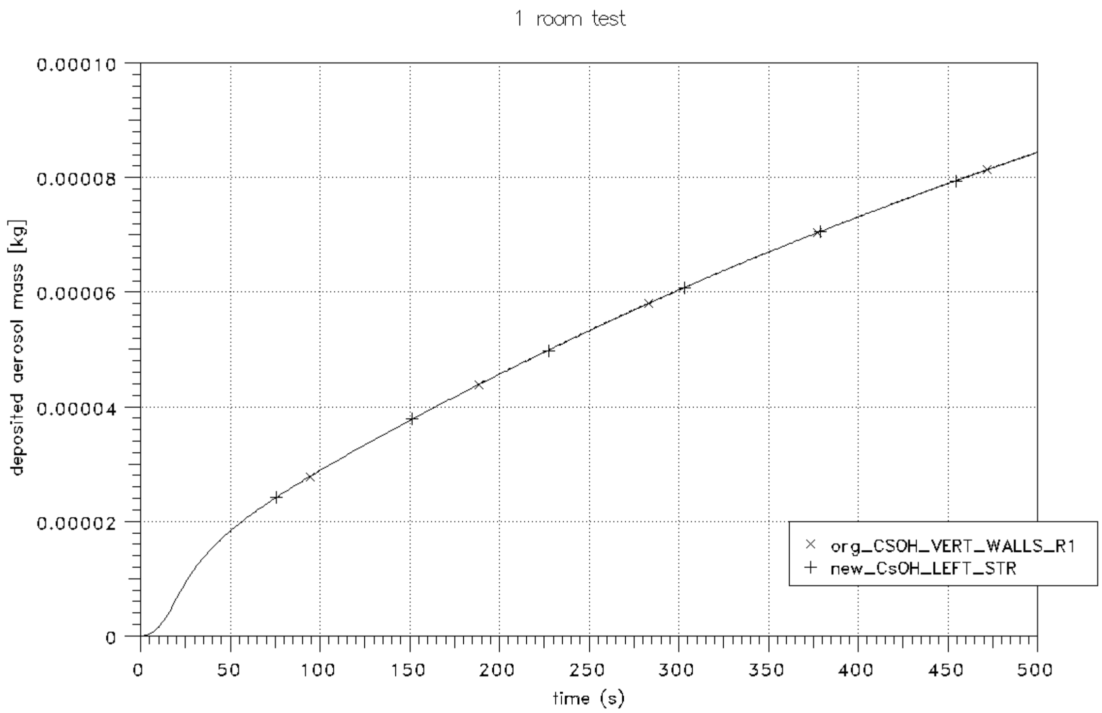


Abb. 2.64 Vergleich der Aerosolablagerung an der Seitenwand

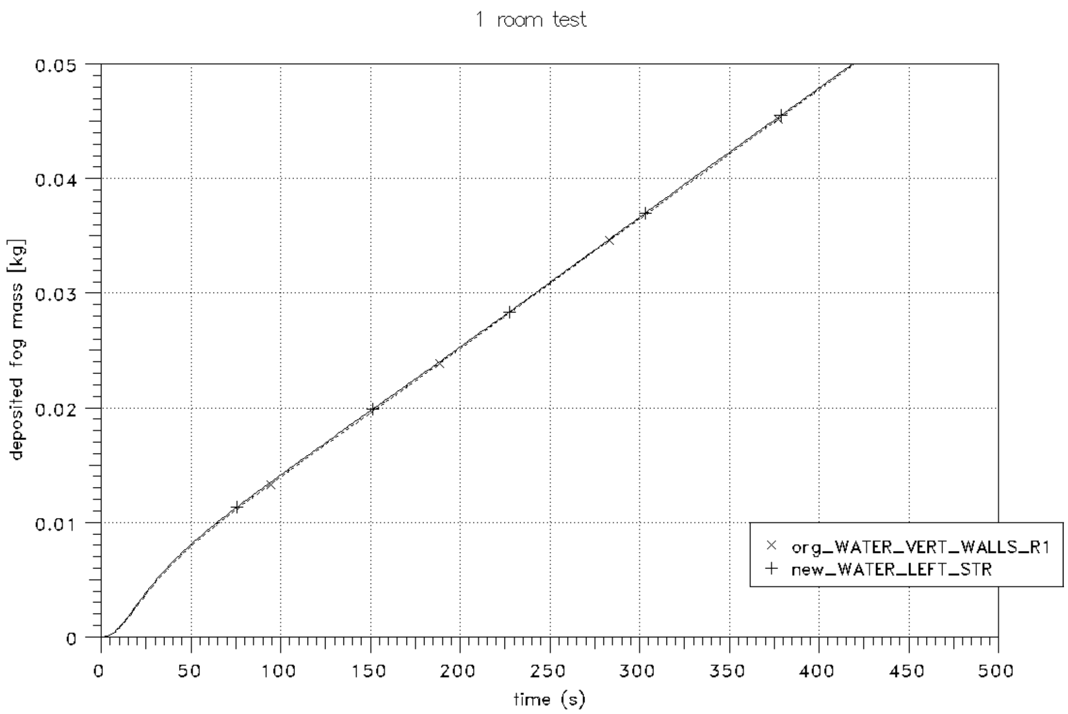


Abb. 2.65 Vergleich der Nebelablagerung an der Seitenwand

Die Abb. 2.66 und Abb. 2.67 zeigen die Größenverteilung des CsOH- und des Nebelaerosols jeweils bei t = 15 s und bei t = 450 s. Die Übereinstimmung ist auch hier sehr gut. Nur in den unteren Größenklassen zeigen sich nach 450 s geringe Abweichungen. Hier ist zu beachten, dass sich die Vorgehensweisen in beiden Versionen unterscheiden: Im neuen AFP-Hauptmodul werden beim Übertragen der Aerosolergebnisse auf die Gesamtbilanz („Speziesbaum“) die gewichteten Größenverteilungen immer wieder auf 1 korrigiert (siehe auch /SPE 12/). Somit ist der Fehler im neuen AFP-Hauptmodul geringer, während sich dieser im originalen Modul akkumulieren kann.

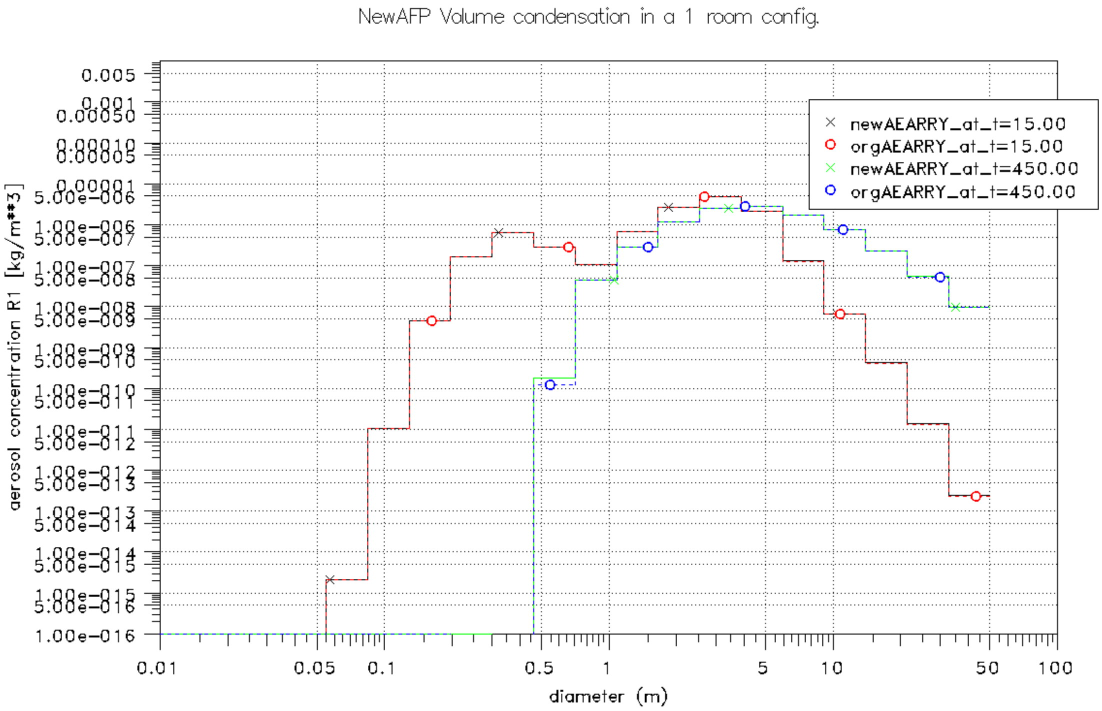


Abb. 2.66 Vergleich der CsOH-Größenverteilung bei t = 15 s und bei t = 450 s

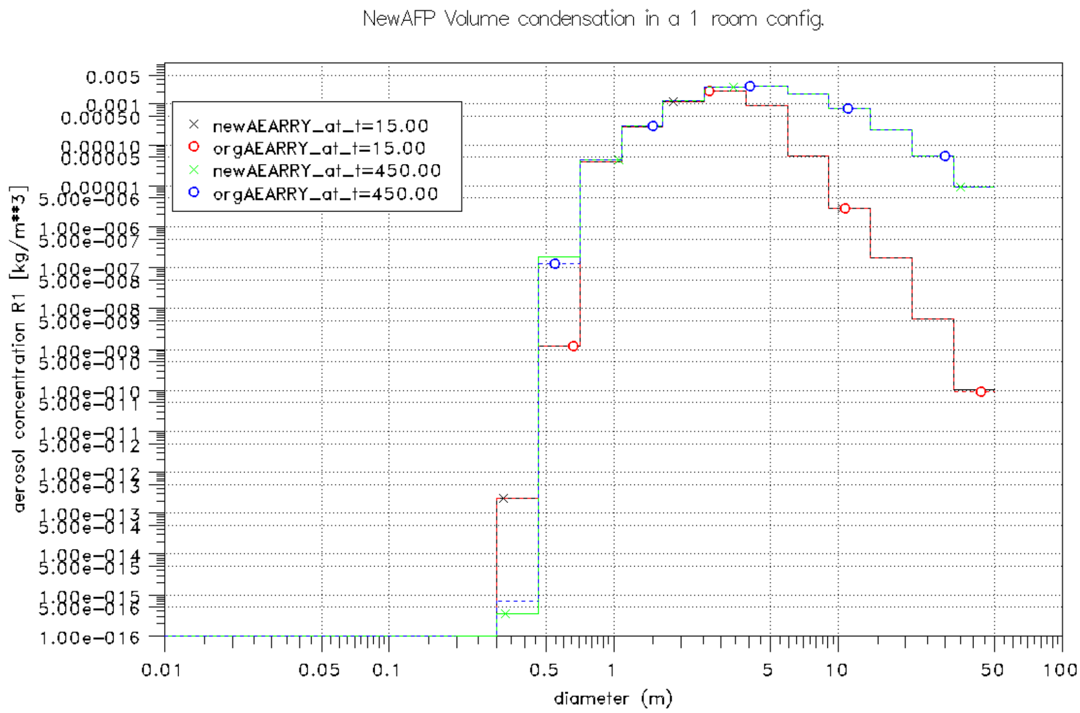


Abb. 2.67 Vergleich der Nebelgrößenverteilung bei t = 15 s und bei t = 450 s

2.4.5 Anbindung des Reko-Direkt-Moduls zur detaillierten Simulation von katalytischen Rekombinatoren

Das Reko-Direkt-Modul wurde für die detaillierte Simulation von schachtartigen katalytischen Rekombinatoren vom Forschungszentrum Jülich /SIM 14/ entwickelt. Im Rahmen des von RWTH Aachen durchgeführten Vorhabens 1501394 ist eine Kopplung des Reko-Direkt-Moduls an COCOSYS vorgesehen. Hierfür wurde die Unterstützung seitens der GRS benötigt. Es wurde vereinbart, dass die GRS die COCOSYS-seitigen Arbeiten im Rahmen des Arbeitspunktes zur Aktualisierung der Infrastruktur in RS1508 durchführt. Seitens der GRS besteht ein Interesse an der Kopplung aufgrund der guten Erfahrungen mit dem in Reko-Direkt realisierten Modell (zum Beispiel anhand der OECD THAI und THAI2 HR-Rekombinatorversuche).

Ursprünglich war eine direkte Einbindung in das THY-Hauptmodul geplant. Wegen der flexiblen Zeitschrittsteuerung (z. B. Reduktion des Synchronisationszeitschrittes durch das THY-Modul) wurde die Kopplung von Reko-Direkt dagegen als eigenständiges Hauptmodul realisiert. Dabei ist es im Prinzip möglich, mehrere Reko-Direkt-Module parallel zu starten. Die Kopplung und Definition der Schnittstellenroutinen wurde dabei

so realisiert, dass der Kern des Reko-Direkt-Moduls eins zu eins in den anderen Varianten (stand-alone, Kopplung mit CFX) verwendet werden kann.

Die zusätzlichen benötigten Eingabedaten werden im COCOSYS-Eingabedatensatz definiert. Dabei werden die Rekombinatoren formal als 1D-Verbindung angesehen, so dass ein Wechsel der Modelle (GRS-1D-Modell, Korrelationen) möglich ist. Die Ausgabe der Reko-Direkt-Ergebnisse erfolgt über die COCOSYS-Ausgabe. Der Restart (wichtig für Anlagenrechnungen) wurde ebenfalls realisiert und geprüft.

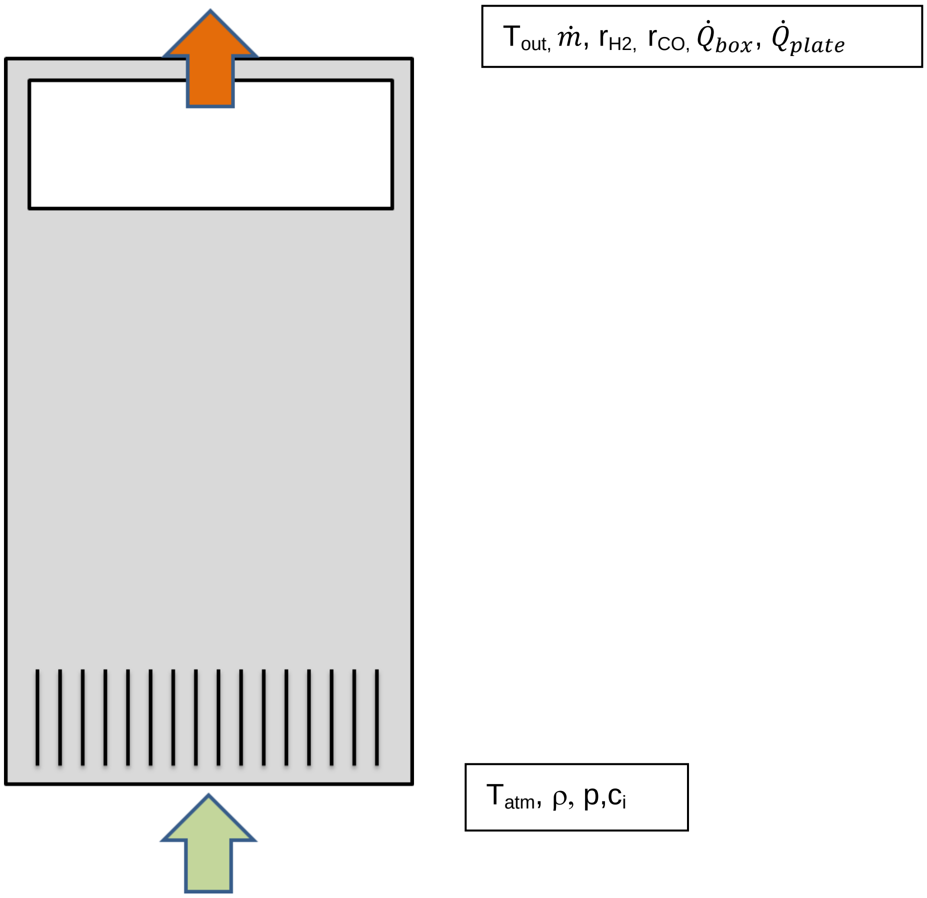


Abb. 2.68 Schnittstellte zwischen Reko-Direkt und COCOSYS

Als Randbedingungen für Reko-Direkt werden Druck p, Atmosphärentemperatur T_{atm}, Dichte ρ (nur für die Anfangsbedingungen) und die Konzentrationen c_i der Gaskomponenten verwendet. Zu beachten ist dabei, dass Reko-Direkt nur die Komponenten Dampf, H_2, O_2 und N_2 verwendet. Dabei wird N_2 als Hintergrundkomponente angesehen. Nebeltröpfchen werden ebenfalls nicht berücksichtigt. Als Ergebnisgrößen werden die Auslasstemperatur T_{out}, der Massenstrom durch den Rekombinator, die Reaktionsraten für H_2 und CO (in Reko-Direkt noch nicht modelliert) sowie die Wärmeverluste am Gehäuse und von den Katalysatorfolien (nach unten) an COCOSYS übergeben. Diese

Größen werden für die Berechnung der im THY-Modul vorhandenen Schnittstellengrößen (z. B. WGFLOW für die Massenströme der einzelnen Komponenten) verwendet (Abb. 2.68).

Die Schnittstelle wurde anhand eines einfachen Testbeispiels überprüft. Dabei wurden konstante Randbedingungen von 4 Vol.-% H_2, 1 bar und 20 °C unter trockenen Bedingungen angenommen. Die Ergebnisse wurden mit dem detaillierten eindimensionalen Modell der GRS (ebenfalls mit dem Diffusionsansatz) und einer gekoppelten CFX-Reko-Direkt Rechnung verglichen.

In den folgenden Abbildungen Abb. 2.69 - Abb. 2.75 sind die Ergebnisse des GRS-1D-Modella rot, die Ergebnisse der gekoppelten Reko-Direkt-COCOSYS-Rechnung (einzeln und parallel) blau und die Ergebnisse der gekoppelten Rechnung von Reko-Direkt mit CFX schwarz dargestellt.

Die Ergebnisse der gekoppelten Rechnungen mit COCOSYS und CFX sind weitgehend identisch. Kleinere Unterschiede ergeben sich für die Gehäusetemperatur (Abb. 2.73). Ursache ist die etwas unterschiedliche Simulation der Wärmeverluste, welche in COCOSYS über Reko-Direkt und in der CFX-Rechnung durch CFX selbst erfolgt. Hier wird das Gehäuse ebenfalls in CFX modelliert. Ebenso sind die Ergebnisse zwischen dem Reko-Direkt-Modell und dem 1D-Modell in COCOSYS-THY vergleichbar. Das Startverhalten ist etwas unterschiedlich (Abb. 2.71). Hier werden im 1D-Modell der GRS die instationären Gleichungen gelöst.

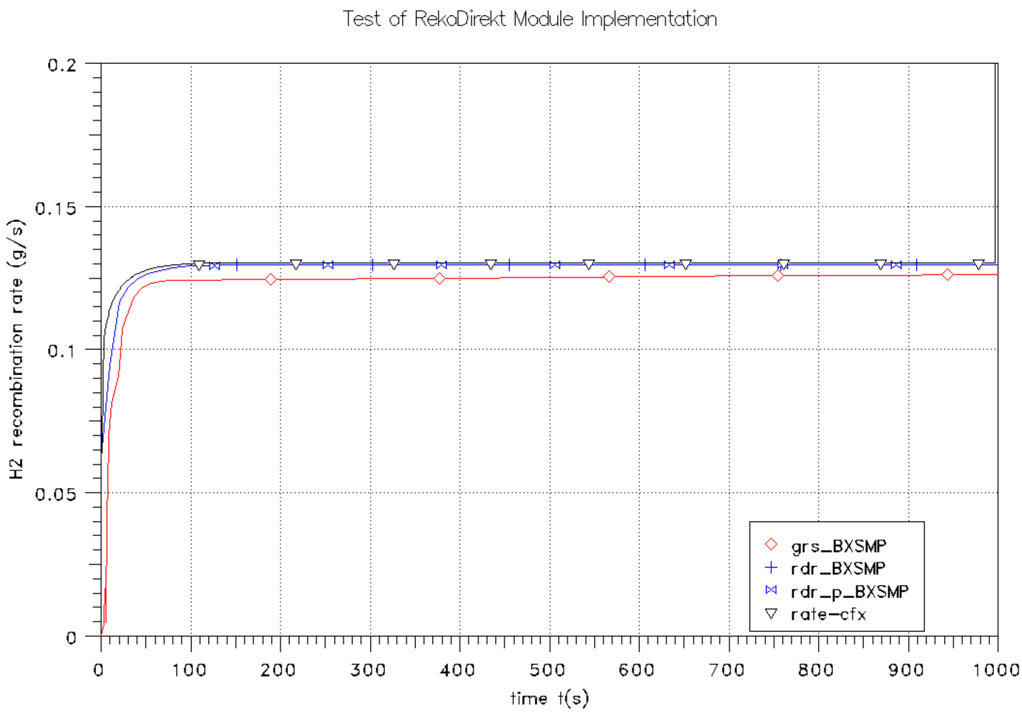


Abb. 2.69 Vergleich der Rekombinationsrate

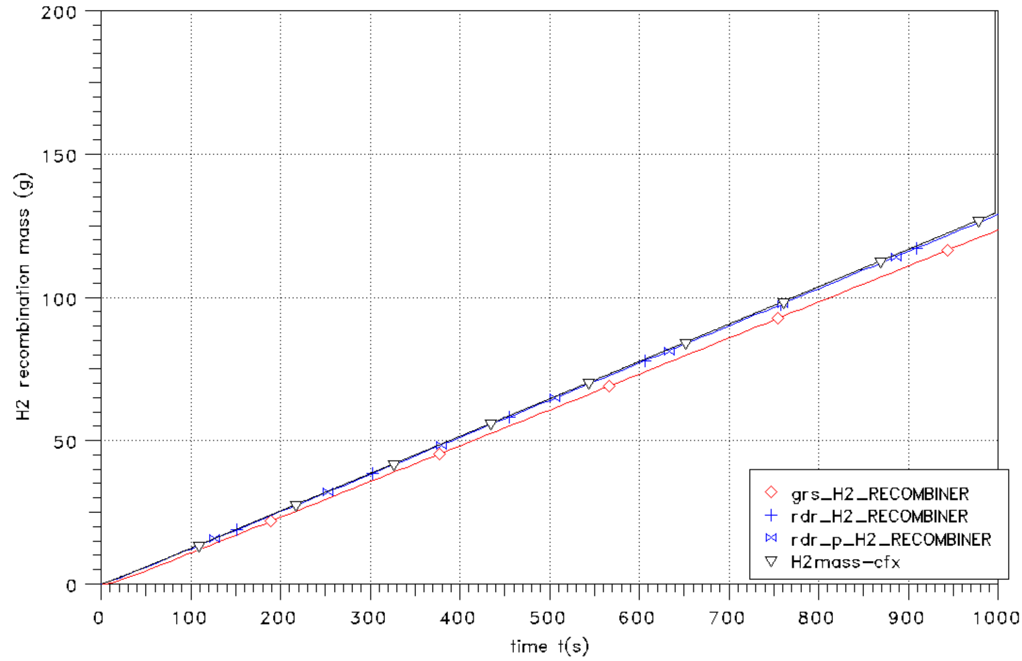


Abb. 2.70 Vergleich der gesamten Abbaurate

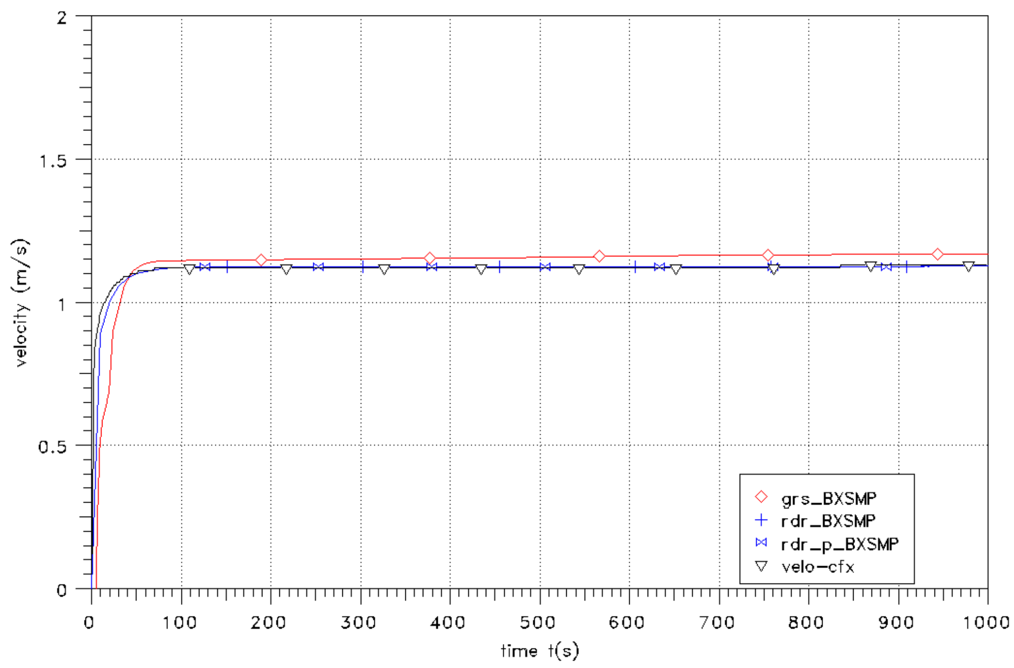


Abb. 2.71 Vergleich der Strömungsgeschwindigkeit im Reko

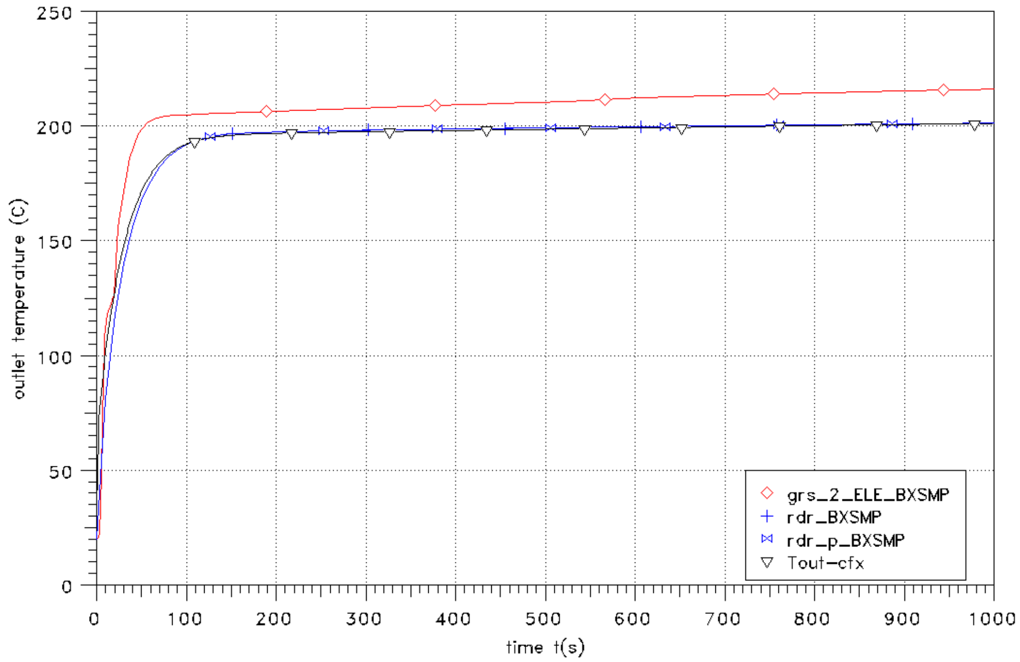


Abb. 2.72 Vergleich der Temperatur am Rekoauslass

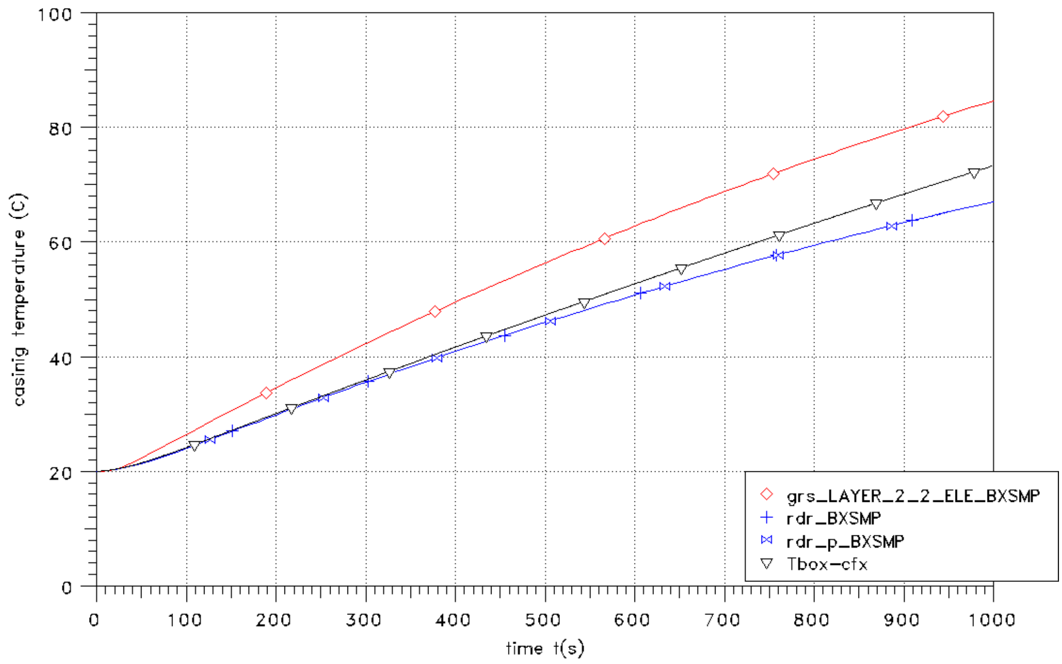


Abb. 2.73 Vergleich der mittleren Gehäusetemperatur

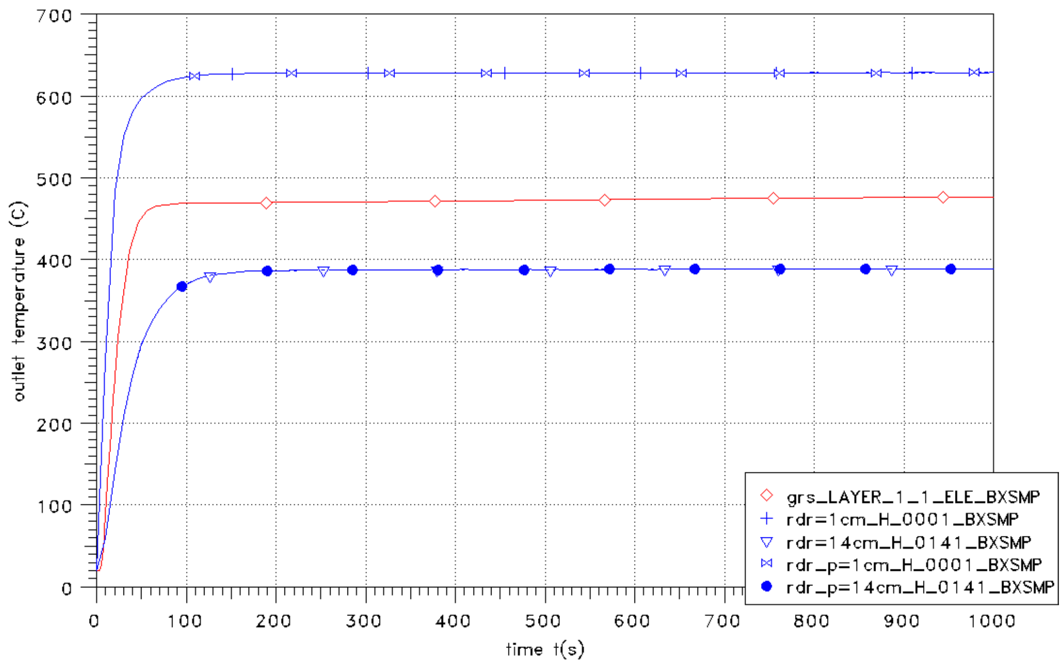


Abb. 2.74 Vergleich der Folientemperatur

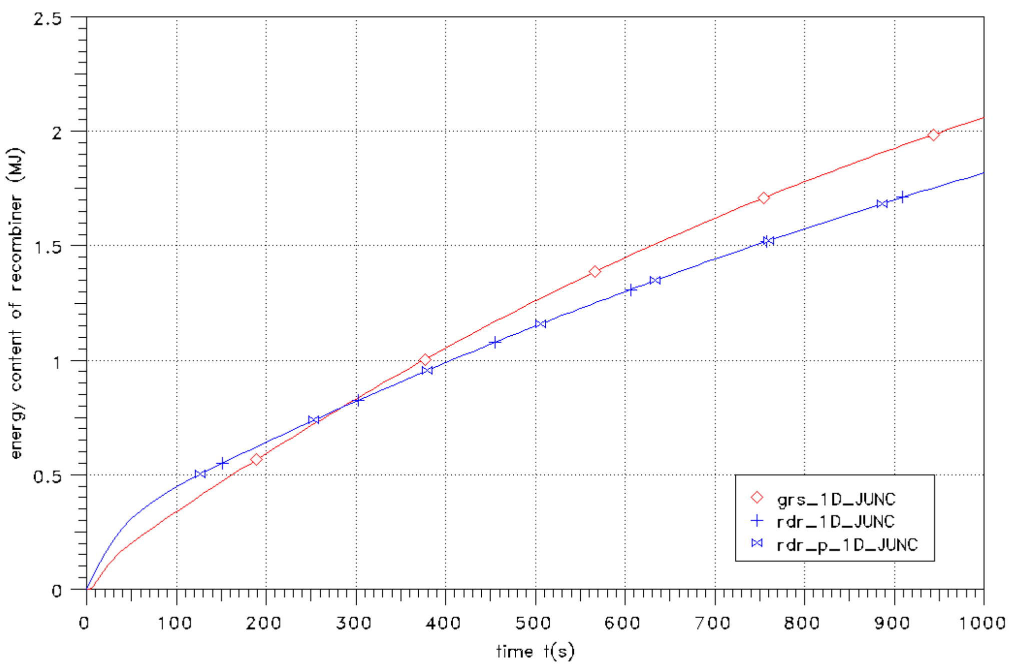


Abb. 2.75 Vergleich des Energieinhalts der Rekombinatoren

2.4.6 Entwicklung eines einfachen Präprozessors für COCPLOT

Zur Auswahl der Ausgabegrößen muss für das COCPLOT-Programm ein sogenanntes Design-File erstellt werden. Hier werden die jeweiligen Ausgabegrößen sowie Rechenoperationen beschrieben. Diese Beschreibung ist aber von der Anzahl sowie der Auswahl der Rechnungen (Beschreibung der Legende) abhängig. Bei sehr umfangreichen Plots sind die notwendigen Änderungen entsprechend aufwändig. Um den Bereich, in dem die Ausgabegrößen beschrieben werden unabhängig von den Rechenfällen zu machen, wurde in COCPLOT ein Präprozessor entwickelt und implementiert. Mit Hilfe eines spezifischen Symbols ‚##' können die Eingabezeilen generalisiert werden. Dies gilt auch für die jeweiligen Kurvensätze Y_i, welche ebenfalls generalisiert werden können (z. B. Y##1). In Abb. 2.76 und Abb. 2.77 ist ein einfaches Beispiel zur Umsetzung dargestellt. Die neuen Möglichkeiten wurden im COCOSYS-Benutzer-Handbuch beschrieben.

```
PRINT OFF
@
C---- CONTROL
@
       NOBATCH  PRINT  HP4200P-PAV   NONE  ENG SIMPLE
@
C---- FILES
@
      CONNECT ventf_E              @ #def_coc   1 cE 3 11
```

```
      CONNECT ventf_V              @ #def_coc  2 CV 4 21
@
C---- ALL_PIC
@
      'MFVF venting '
@
      'Time (h)'         0.  25.  5
@
C---- PICTURE
@
@     LIST OF ALL PICTURE NAMES
@
      PRESS_1
@
K---- PRESS_1
@
      'Total and partial pres.(bar)'          0. 8.0 4
                                         UR  0.0  0.0
      ## RALOC 'ZTOPRE(GAS,RCONT)' ##   ##  ##  1. 0. 1. 0.
      DEFINE Y##1   ## RALOC 'ZTOPRE(GAS,RCONT)'
      TRANS  Y##1  Y##2   2.0 0.
      INT Y##2  Y##3
      DRAW Y##3  ##  ##   ##
@
C---- END
```

Abb. 2.76 Verwendung des COCPLOT Präprozessors

```
PRINT OFF
@
C---- CONTROL
@
       NOBATCH  PRINT  HP4200P-PAV   NONE  ENG SIMPLE
@
C---- FILES
@
      CONNECT ventf_E              @ #def_coc  1 cE 3 11
      CONNECT ventf_V              @ #def_coc  2 cV 4 21
@
C---- ALL_PIC
@
     'MFVF venting '
@
      'Time (h)'         0.  25.  5
@
C---- PICTURE
@
@     LIST OF ALL PICTURE NAMES
@
      PRESS_1
@
K---- PRESS_1
@
      'Total and partial pres.(bar)'          0. 8.0 4
                                         UR  0.0  0.0
      1 RALOC 'ZTOPRE(GAS,RCONT)' cE   3  11   1. 0. 1. 0.
      2 RALOC 'ZTOPRE(GAS,RCONT)' cV   4  21   1. 0. 1. 0.
      DEFINE Y11   1 RALOC 'ZTOPRE(GAS,RCONT)'
      DEFINE Y21   2 RALOC 'ZTOPRE(GAS,RCONT)'
      TRANS  Y11  Y12   2.0 0.
      TRANS  Y21  Y22   2.0 0.
      INT Y12  Y13
      INT Y22  Y23
      DRAW Y13  cE  3   11
      DRAW Y23  cV  4   21
@
```

Abb. 2.77 Resultierende Ausgabe nach Preprozessing

3 Weiterentwicklung von ASTEC

3.1 Entwicklungsstand von ASTEC und Aufgaben im Vorhaben

ASTEC liegt aktuell in der Version ASTEC V2.0 vor und besteht im Wesentlichen aus folgenden Modulen (Abb 3.1):

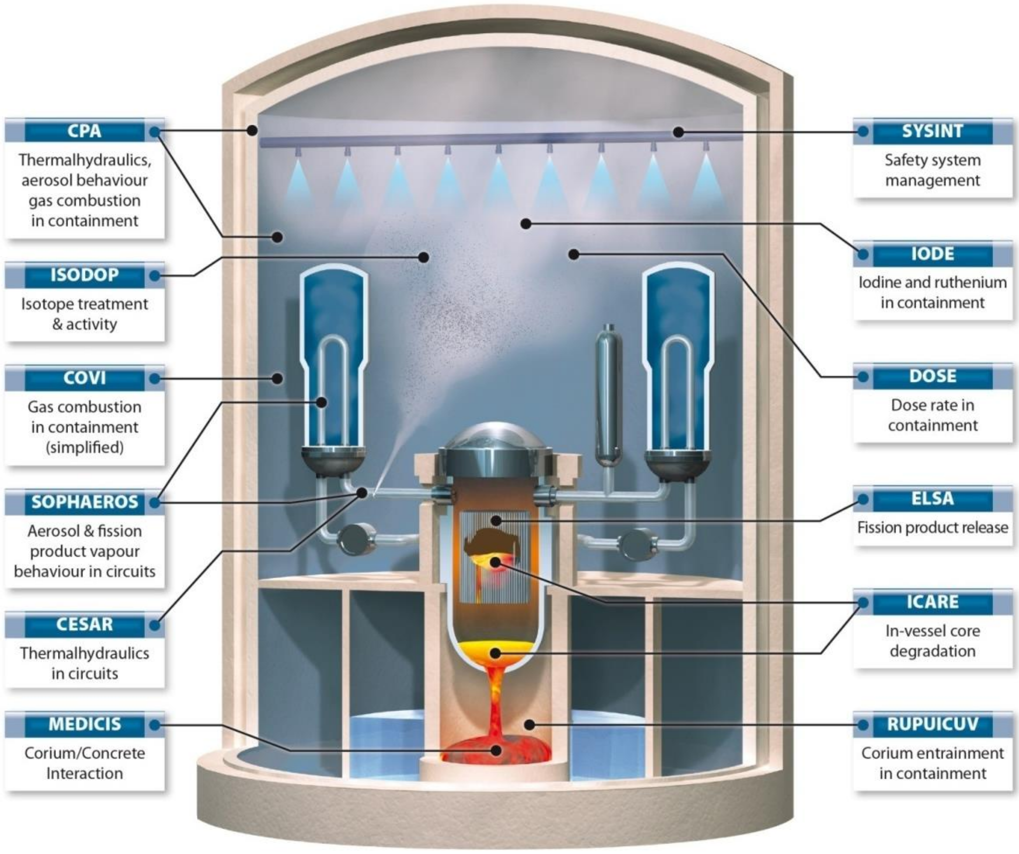


Abb. 3.1 Struktur von ASTEC V2

– **CESAR:** Modul zur Beschreibung der zweiphasigen Thermohydraulik im gesamten Reaktorkühlkreislauf einschließlich Druckhalter. Die zwei Phasen sind Wasser und Dampf mit weiteren nichtkondensierbaren Gasen (z. B. Wasserstoff). Mit Beginn des Kernschmelzens wird auf das Modul ICARE umgeschaltet und die Thermohydraulik im Reaktordruckbehälter von ICARE berechnet. CESAR berechnet dann nur noch die Thermohydraulik im Reaktorkühlkreislauf. Eine Änderung ist für die Version 2.1 vorgesehen (einheitliche Thermohydraulik), die in einer beta-Version bereits im Rahmen von CESAM getestet werden kann.

- **ICARE:** Modul zur Beschreibung des Kernschmelzens im RDB. Wesentliche Phänomene des Kernschmelzens sowie der Kernverlagerung bis hin zum RDB-Versagen werden modelliert. Nach Beginn des Kernschmelzens simuliert ICARE mit vereinfachten Modellansätzen die Zwei-Phasen-Thermohydraulik im Kern. Gegenüber dem in der Version V1 verwendeten Modul DIVA ermöglicht ICARE eine erweiterte zweidimensionale Simulation des Kernzerstörungsvorgangs. Das Modul ist die Basis für die neue Kopplung von Thermohydraulik (CESAR) und Kernzerstörungsprozessen (ICARE), wie oben erwähnt.
- **ISODOP:** Modul zur Beschreibung des Zerfalls von Spaltprodukten und Aktinid-Isotopen
- **ELSA:** Modul zur Beschreibung der Spaltproduktfreisetzung aus den Brennstäben während der Kernzerstörung.
- **SOPHAEROS:** Modul zur Beschreibung des Transports und Verhaltens von Spaltprodukten und Aerosolen im Reaktorkühlkreislauf.
- **RUPUICUV:** Modul zur Beschreibung der Freisetzung von Schmelze nach RDB-Versagen in die Reaktorgrube inklusive eines möglichen Austrags fragmentierter Schmelzepartikel aus der Reaktorgrube in den Sicherheitsbehälter bei Versagen des RDB unter hohem Druck.
- **MEDICIS:** Modul zur Beschreibung der Schmelze-Beton-Wechselwirkung in einer Reaktorgrube nach RDB-Versagen.
- **CPA:** Modul zur Beschreibung wesentlicher Vorgänge im Sicherheitsbehälter (Synthese mit wesentlichen COCOSYS Teilen) mit den folgenden zwei Untermodulen:
  - THY für die Thermohydraulik im Sicherheitsbehälter:
    Dieses Modul beschreibt Prozesse und Phänomene wie Gasverteilung, Druckaufbau, Wasserstoffverbrennung, Wassertransport, Wasserstoffrekombination mit katalytischen und thermischen Rekombinatoren, Verhalten von Sicherheitssystemen und Pumpensystemen usw.
  - AFP für das Aerosol- und Spaltproduktverhalten im Sicherheitsbehälter:
    Die Modelle für Aerosol- und Spaltproduktverhalten (Transport und Ablagerungsvorgänge) basieren auf den entsprechenden Modellen in COCOSYS. Der Aerosoltransport durch Wasservorlagen wird mit dem Pool-Scrubbing-Modell SPARC-B simuliert. Mittelfristig ist von IRSN vorgesehen, AFP durch SOPHAEROS zu ersetzen.

- **IODE:** Modul zur Beschreibung des Iodverhaltens im Sicherheitsbehälter (Wasserpool- und Gasphase). Es beschreibt die chemischen Reaktionen in Wasser- und Gasphase, Iodtransport zwischen Wasserpool und Atmosphäre, Adsorption/Desorption an Wänden. Es ist nicht mit dem in COCOSYS verwendeten Modul AIM identisch und die Entwicklung wird nur von IRSN durchgeführt. Die aktuelle Entwicklung betrifft die Bildung organischen Iods im Wasserpool und in der Gasphase (Funke-Modell) und ein neues Modell für die radiolytische Bildung von I_2 und Organoiod. Eine Integration von IODE in SOPHAEROS läuft bei IRSN, um die Prozesse zum Aerosol- und Iodverhalten im Kreislauf und Containment auf eine einheitliche Modellbasis zu stellen.

- **SYSINT:** Modul zum Management technischer Sicherheitseinrichtungen (Pumpensysteme, SB-Sprühsysteme, Druckspeicher etc.).

- **COVI (bzw. CPA-FRONT):** Modul zur Beschreibung der Wasserstoff-Verbrennung im Sicherheitsbehälter. Alternativ ist auch das Flammenfront-Modell FRONT in CPA verfügbar, welches die Ausbreitung der Flammenfront durch die Räume des SB vereinfacht modelliert. Die Entwicklung durch die GRS ist quasi abgeschlossen und wird zzt. noch mit IRSN abschließend diskutiert.

- **DOSE:** Modul zur Beschreibung der Dosisleistung in der Sicherheitsbehälteratmosphäre.

- **MDB:** einheitliche Materialdatenbasis, die zunehmend für alle Module, einschließlich CPA (im Unterschied zu COCOSYS) angewendet wird.

Der Datenaustausch zwischen den Modulen zur Kopplung der physikalischen Prozesse erfolgt über die SIGAL-Datenbank, in der alle wesentlichen Daten pro Makro-Zeitschritt gespeichert werden. ASTEC kann in zwei Modi betrieben werden:

- zur Analyse des gesamten Anlagenverhaltens im gekoppelten Modus ausgewählter Module und

- für Einzeluntersuchungen von Phänomenen und Prozessen im Stand-alone-Modus eines einzelnen Moduls.

Bezüglich der ASTEC Weiterentwicklung wurden von Seiten der GRS die folgenden Einzelzielsetzungen verfolgt:

- **AP2.1 Modellentwicklung für LWR-Anlagen**

  Der Rechencode ASTEC wurde – in Absprache mit IRSN und basierend auf Arbeiten im Vorläufervorhaben RS1185 – für Vorgänge nach Versagen des RDB bei der Freisetzung und Dispersion von Schmelze in den Sicherheitsbehälter (SB) und dem damit verbundenen Energieeintrag in den SB (Direct Containment Heating – DCH) weiterentwickelt.

- **AP2.2 Modellentwicklung für GEN-IV-Anlagen**

  Unter Führung von IRSN hat sich die GRS an ersten Arbeiten zur Sicherstellung der Zukunftsfähigkeit von ASTEC im Hinblick auf die Anwendung auf neue Reaktorkonzepte der Generation IV beteiligt. Das JASMIN-Projekt (Joint Advanced Severe Accidents Modelling and Integration for Na-Cooled Fast Neutron Reactors) soll als „Collaborative Project“ der Europäischen Kommission die Bewertung und Verbesserung der Sicherheit von SFR (sodium-cooled fast reactor) ermöglichen, speziell mit Blick auf das Gesamtverhalten der Anlage sowie auf den Quellterm. Die GRS war insbesondere an der Spezifikation von Modellierungsbedarf für Vorgänge im SB beteiligt.

- **AP2.3 Aktualisierung der Code-Infrastruktur**

  Ähnlich wie bei COCOSYS sind auch bei der Entwicklung von ASTEC Arbeiten zur Aktualisierung und Pflege der Codestruktur durchgeführt worden, um den Stand von F&E im Hinblick auf den Status der Modelle, die Anwendbarkeit und Benutzerfreundlichkeit des Rechenprogramms fortzuschreiben. In diesem Vorhaben betraf dies insbesondere die ASTEC-Module CPA für die Simulation der Thermohydraulik und des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens im SB und MEDICIS für die Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung.

Der Entwicklungsbedarf für ASTEC leitet sich aus verschiedenen Quellen ab. Der langfristige Entwicklungsplan wird in den aus GRS- und IRSN-Mitgliedern paritätisch besetzten Kontroll- und Arbeitsgremien gemeinsam erarbeitet und definiert und basiert sowohl auf neuen Erkenntnissen aus Wissenschaft und Technik als auch auf eigenen Analysen der Entwickler. Zunehmend erwachsen aber aus den Arbeiten der ASTEC Anwender innerhalb des Exzellenz-Netzwerkes der Europäischen Kommission (Severe Accident Research NETwork – SARNET 1 und 2) zusätzliche Anforderungen an die Entwickler. Solche zusätzlichen, oftmals kurzfristigen Anforderungen ergeben sich meist aus der Bearbeitung und Analyse sogenannter MARCUS-Anfragen. MARCUS stellt eine WWW basierte Plattform zur Unterstützung der ASTEC Anwender dar.

Entsprechend dem langfristigen Entwicklungsplan sind bestimmte Entwicklungsabschnitte definiert, zu denen dann jeweils eine neue ASTEC Version freigegeben und für den Download von der SARNET-Seite im Internet bereitgestellt wird. Zusätzlich können nach Bedarf bzw. bei größeren Änderungen im Programm, die eine Herausgabe einer neuen Version sinnvoll machen, sog. Revisionen definiert werden. Die genauen Randbedingungen sind neben anderen qualitätssichernden Maßnahmen in /DOR 07/ festgehalten.

Mit dem jetzigen Abschluss des Vorhabens ist ein Überblick über die während der Laufzeit freigegebenen Versionen hilfreich; dies verdeutlicht gleichzeitig auch den hohen Entwicklungsbedarf und -status. Die freigegebenen Versionen (‚Releases') und Revisionen (‚Revisions') bzw. Patches seit Projektbeginn sind:

- ASTEC-V2.0 revision 2 patch 2 (Juli 2012)
- ASTEC-V2.0 revision 3 (Juli 2013)
- ASTEC-V2.0 revision 3 patch 1 (Dezember 2013)
- ASTEC-V2.0 revision 3 patch 2 (Juli 2014)
- ASTEC-V2.1 beta Version (Sommer 2014, nur im Rahmen von CESAM).

3.2 Weiterentwicklung des DCH-Modells

Hintergrund

Im Vorläufervorhaben RS1185 wurde mit der Integration eines DCH-Modells (Direct Containment Heating) der GRS in ASTEC begonnen, welches den Austrag von Schmelze aus dem RDB in die Reaktorgrube unter erhöhtem Systemdruck sowie die Verteilung von feinen Partikeln in die Atmosphäre angrenzender Raumbereiche im Sicherheitsbehälter (SB) beschreibt. Ein zentraler Vorgang, der die Phänomene während DCH maßgeblich beeinflusst, ist die Fragmentation von Schmelze während des Blowdowns und deren Austrag aus der Reaktorgrube in größere Raumbereiche des SB.

Basis dieses in ASTEC/CPA eingebauten Modells ist das vorhandene DCH-Modell in COCOSYS. Dieses ist relativ rechenaufwändig, da die Berechnung des Transports von Masse und Energie der luftgetragenen Schmelze, sortiert nach Größenklasse, die Lösung zusätzlicher Differentialgleichungen erfordert. IRSN hatte zum Zweck ähnlicher

Analysen für den ITER-Fusionsreaktor bereits entsprechende Datenstrukturen und Methoden im Thermohydraulikteil CPA von ASTEC angelegt. Mit Hilfe dieser Datenstrukturen und Methoden werden luftgetragene Partikel und ihr Transport im SB ähnlich wie bei COCOSYS repräsentiert. Mit IRSN war vereinbart worden, dass die GRS die im Vergleich zu COCOSYS noch fehlenden physikalischen Modelle, die für die Darstellung von DCH-Effekten in DWR-Anlagen erforderlich sind, in den in ASTEC bereits für ITER eingebrachten Formalismus für die Repräsentation und den Transport von Materialpartikeln im SB ergänzt und erprobt.

Mit dieser Zielsetzung war in RS1185 die Kodierung der Modelle in ASTEC um die Beschreibung des Massentransports von Schmelzepartikeln mit der Gasströmung unter DCH-Bedingungen erweitert worden. Folgende Modelle wurden eingebracht:

- Austrag von Schmelze aus dem RDB in die Reaktorgrube,
- Aufwirbeln von auf dem Boden der Reaktorgrube abgelagerter Schmelze und Eintrag in die Gasströmung (Entrainment),
- Transport luftgetragener Schmelzetropfen,
- Ablagerung von Schmelze unter Gravitationseinfluss.

Mit diesen Modellen war es am Ende von RS1185 möglich, ausgewählte, in der DISCO-Anlage am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) durchgeführte Experimente zur Dispersion kalter Flüssigkeiten während des Blowdowns unter DCH-Bedingungen nachzurechnen, z B. das Experiment D06 der „kalten“ D-Versuchsserie mit Wasser /SPE 12/.

In RS1508 wurde aufbauend auf den Vorarbeiten in RS1185 das DCH-Modell in ASTEC/CPA um die Phänomene im Zusammenhang mit heißen Mischschmelzen (Metalle / Oxide) in reaktiver Atmosphäre erweitert. Es handelt sich hierbei um die Berechnung chemischer Reaktionen zwischen luftgetragener, metallischer Schmelze mit der Atmosphäre sowie um Wärmeübergänge zwischen Schmelze und Gas.

Die neu implementierten Modelle sind anhand von einfachen Testbeispielen auf ihre Korrektheit überprüft worden. Nachrechnungen zu den heißen DISCO-Versuchen zeigen akzeptable Übereinstimmungen zwischen ASTEC und dem Experiment. Die vorhandene und erfolgreich getestete Implementierung ist zur Qualitätssicherung vollständig modularisiert worden. Die Ergebnisse des Modells in seiner neuen, modularisierten

Programmstruktur sind mit denen der ursprünglichen Implementierung detailliert verglichen worden. Bei dieser Überprüfung zeigte sich eine vollständige Übereinstimmung. Alle Ergebnisse wurden abschließend in einem Bericht dokumentiert /ECK 14/.

Wesentliche Merkmale des ASTEC-Modells

Für das Ausströmen von Schmelze und Gas aus dem RDB wird eine einphasige Modellannahme getroffen, nach der zunächst die Schmelze einphasig ausströmt und danach das Gas. Nach RDB-Versagen strömt die Schmelze aus dem Leck gemäß Bernoullis Gleichung aus:

$$\dot{m} = C_{dis} A_h \sqrt{2 \Delta p \rho_m} \qquad (3.1)$$

In Gl. 3.1 bezeichnen Δp die Druckdifferenz zwischen RDB und Reaktorgrube, ρ_m die Dichte der Schmelze, A_h die volle Leckquerschnittsfläche und C_{dis} den Entladungskoeffizienten. Wenn die verbliebene Schmelzemasse im RDB unter einen im Input festzulegenden Wert fällt, stoppt die Ausströmung von Schmelze aus dem RDB und die Gasströmung beginnt.

Das Entrainment-Modell in ASTEC ist ein vereinfachter Ansatz, in dem die Entrainment-Rate ϵ im Wesentlichen auf die wirksame Scherspannung zwischen Gas und Flüssigkeit ($\sim v_g^2$) und das Schmelzevolumen in der Reaktorgrube (M_{cav}/ρ_m) zurückgeführt wird. Weitere nicht im Detail betrachtete Effekte werden in einem empirischen Vorfaktor K_c projiziert, der in speziellen Experimenten zu der jeweiligen Geometrie angepasst werden muss.

$$\epsilon(t) = \frac{M_{cav}(t)}{\rho_m} K_c v_g^2(t) \qquad (3.2)$$

Der Transport von luftgetragenen Schmelzepartikeln aus der Grube in Nachbarräume wird durch die gleichzeitige Ablagerung von Schmelze in der Reaktorgrube begrenzt. Für die Ablagerung von Schmelze in der Reaktorgrube wird ein vereinfachter Ansatz für die Ablagerungsrate τ gewählt:

$$\tau(t) = C M_{cav}^{g}(t) \qquad (3.3)$$

In Gl. 3.3 stehen M_{cav}^{g} für die Masse der luftgetragenen Schmelze in der Reaktorgrube und C für einen Ablagerungskoeffizienten, der hauptsächlich von der Geometrie der Reaktorgrube abhängt. Das Modell vernachlässigt ein mögliches Wiederaufwirbeln von einmal abgelagerter Schmelze. In anderen Zonen der Reaktorgrube wird die Ablagerung auf den Einfluss der Gravitation (Sedimentation) zurückgeführt.

Für die Konsequenzen von DCH ist der Wärmeübergang zwischen luftgetragenen Schmelzepartikeln und der Atmosphäre von großer Bedeutung. Der konvektive Wärmeübergang wird durch die Nußelt-Zahl für erzwungene Umströmung einer Kugel charakterisiert:

$$\mathrm{Nu} = 2 + 0{,}6\,\mathrm{Re}^{1/2}\mathrm{Pr}^{1/3} \qquad (3.4)$$

Re und Pr stehen für die Reynolds- bzw. die Prandtl-Zahl. Nu wird bei einer mittleren Temperatur T' zwischen Schmelze und Atmosphäre ermittelt und der konvektive Wärmeübergang wird durch Gl. 3.5 berechnet.

$$\dot{q}_{conv} = hA_m(T_m - T_g) \qquad (3.5)$$

Hierin ist h der Wärmeübergangskoeffizient entsprechend der Nußelt-Zahl Nu und T_m und T_g sind die Temperaturen von Schmelze und Gas. A_m ist die kumulative Fläche der luftgetragenen Partikel und wird mit Gl. 3.6 berechnet.

$$A_m = \frac{6\,m_m}{\rho_m d} \qquad (3.6)$$

m_m: integrale Schmelzemasse, d: charakteristischer Tropfendurchmesser bei angenommener monodisperser Verteilung.

Der Strahlungswärmeübergang wird mit einem grauen Strahlungsgesetz angenähert:

$$\dot{q}_{rad} = \varepsilon\,\sigma A_m(T_m^4 - T'^4) \qquad (3.7)$$

Hier stehen σ für die Stephan-Boltzmann-Konstante und ε für den Emissionsgrad, typischerweise bei 0,8. Der Wärmeübergang zwischen Schmelze und Strukturen wird analog hierzu berechnet.

An chemischen Reaktionen werden die Oxidationsreaktionen zwischen metallischen Schmelzeanteilen und dem Wasserdampf,

$$Zr + 2H_2O \rightarrow ZrO_2 + 2\,H_2 \tag{3.8}$$

$$2\,Al + 3H_2O \rightarrow Al_2O_3 + 3\,H_2 \tag{3.9}$$

$$2\,Cr + 3\,H_2O \rightarrow Cr_2O_3 + 3\,H_2 \tag{3.10}$$

$$Fe + H_2O \rightarrow FeO + H_2 \tag{3.11}$$

sowie analog die entsprechenden Reaktionen der Metalle Zr, Fe, Cr, Al mit Sauerstoff berücksichtigt. Die sequentielle Berechnung der Reaktionen erfolgt wie in der Liste hierarchisch von oben nach unten, sodass für die nächst niedrigere Hierarchie weniger vom gasförmigen Reaktionspartner zur Verfügung steht. In bisherigen Untersuchungen zu DCH wurde gefolgert, dass die Metalle zunächst mit dem sie im Blowdown-Strahl umgebenden Wasserdampf reagieren, bevor sie mit dem Luftsauerstoff in Kontakt treten. Dies wird ebenso bei der Abarbeitung der Reaktionen berücksichtigt. Die bei den Reaktionen umgesetzte Energie wird inhärent über die in der Stoffdatenbank MDB hinterlegten Tabellen für spezifische Enthalpien der einzelnen Spezies berücksichtigt und es wird angenommen, dass die Reaktionswärme direkt in den Tropfen umgesetzt wird. Die chemischen Reaktionen werden durch diffusiven Transport der Reaktionspartner zur Interaktionsfläche auf den Tropfen begrenzt.

Überprüfung des Modells

Die Blowdown-Phase wurde zunächst erfolgreich an Experimenten überprüft, bei denen kein Schmelzeausstoß aus dem RDB stattfand. In den DISCO-Experimenten L05 und L06 wurde nur Gas aus dem RDB abgeblasen. Am Beispiel des Experimentes DISCO-L05 zeigt die Abb. 3.2, dass das Modell wichtige Parameter wie den Druck im RDB und die Gasgeschwindigkeit in der Reaktorgrube während des Blowdowns ausreichend gut wiedergibt.

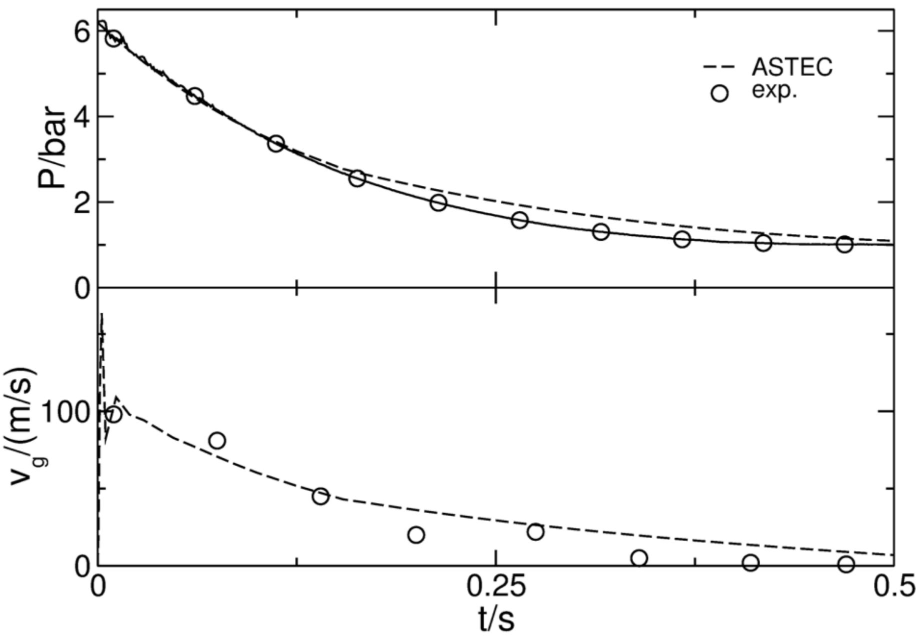


Abb. 3.2 Druck im RDB (Abbildung oben) und Gasgeschwindigkeit in der Reaktorgrube (Abbildung unten) im Experiment DISCO-L05 und Rechnung

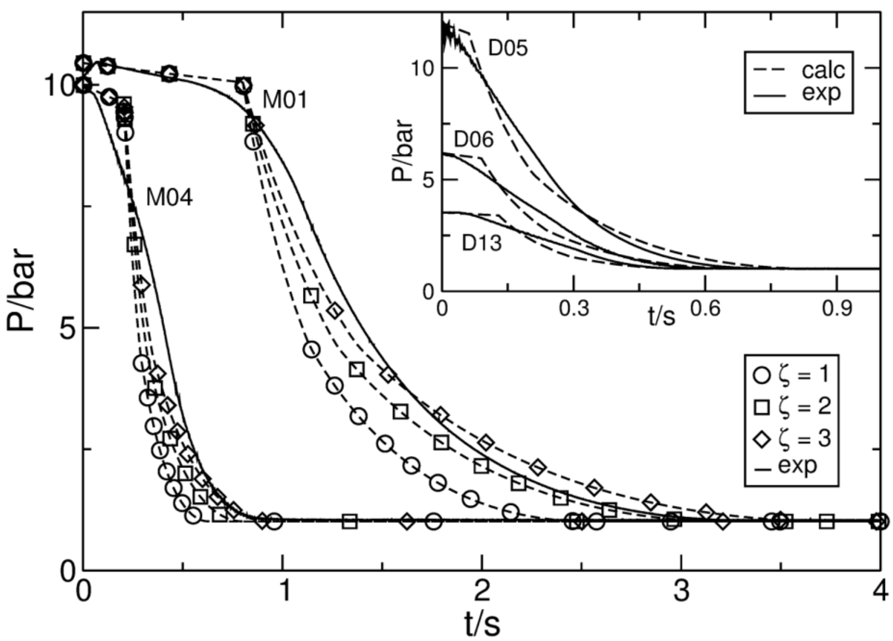


Abb. 3.3 Druckverhalten im RDB für den Blowdown eines Woodschen Metalls/Gas (Serie „M") sowie von Wasser/Gas (Serie „D") in Rechnung (gestrichelt) und Experiment (durchgezogene Linie)

In der nächsten Phase der Modellüberprüfung wurden Experimente in der DISCO-Anlage betrachtet, bei denen Flüssigkeiten unterschiedlicher Dichte (u. a. Wasser und Woodsches Metall) unter angehobenem Druck einer Stickstoffgasatmosphäre aus dem RDB ausgeblasen wurden. Die Qualität der Annäherung an die Messung (Abb. 3.3)

hängt vom verwendeten Widerstandsbeiwert ζ in der Strömungsverbindung zwischen RDB und Reaktorgrube ab. Für ζ = 3 ergeben sich befriedigende Übereinstimmungen.

Ein für die Konsequenzen von DCH wichtiger Parameter ist die Intensität des Schmelzeaustrags aus der Reaktorgrube in große Containmenträume während des Blowdowns. Abb. 3.4 und Abb. 3.5 werten diesen Parameter in Relation zur Gesamtmasse der ausgestoßenen Schmelze für die Versuchsserie „D" mit Wasser und „M" mit Woodschem Metall aus.

Mit einem Entrainment-Koeffizienten von K_c= 60 in Gl. (3.2) und einem Ablagerungskoeffizienten von C = 30 ... 40 in Gl. (3.3) ergeben sich befriedigende Übereinstimmungen für die Experimente mit Wasser der „D"-Serie (Abb. 3.4). Auch für die Versuche mit Woodschem Metall (Serie „M") werden mit den oben genannten Parameterkombinationen (K_c= 60, C = 30 ... 40) ausreichende Übereinstimmungen zum Experiment erzielt (Abb. 3.5). Die Versuchsserie „M" mit dem Woodschen Metall ist zusätzlich zu den Wasserversuchen „D" durchgeführt worden, um den Einfluss der Dichte auf die Vorgänge beim Austrag der Schmelze zu untersuchen. Woodsches Metall besitzt eine ähnliche Dichte wie eine prototypische Coriumschmelze. Unsicherheiten bei der Extrapolation der Parameter für eine reale Anlage werden daher vor allem in dem Einfluss der Geometrie gesehen.

In der letzten Stufe der Modellüberprüfung wurde das Modell auf Experimente mit heißer Schmelze (Thermit auf Eisen/Aluminiumoxid-Basis) in reaktiver Atmosphäre angewandt. Die Versuchsserie DISCO-H betrachtete eine an den Europäischen Druckwasserreaktor (EPR) angelehnte Geometrie. Für das Experiment H02 wurden ebenfalls gute Übereinstimmungen beim Druck- und Temperaturverhalten in den Containment-Räumen erzielt (Abb. 3.6, Abb. 3.7), der Vorfaktor für das Entrainment musste aber von K_c= 60 auf K_c= 1,5 heruntergesetzt werden. In dieser Rechnung wurden gute Übereinstimmungen mit dem Experiment ebenso für die Verteilung der abgelagerten Schmelzemasse auf Containment, Subcompartment und Reaktorgrube erzielt (Abb. 3.7).

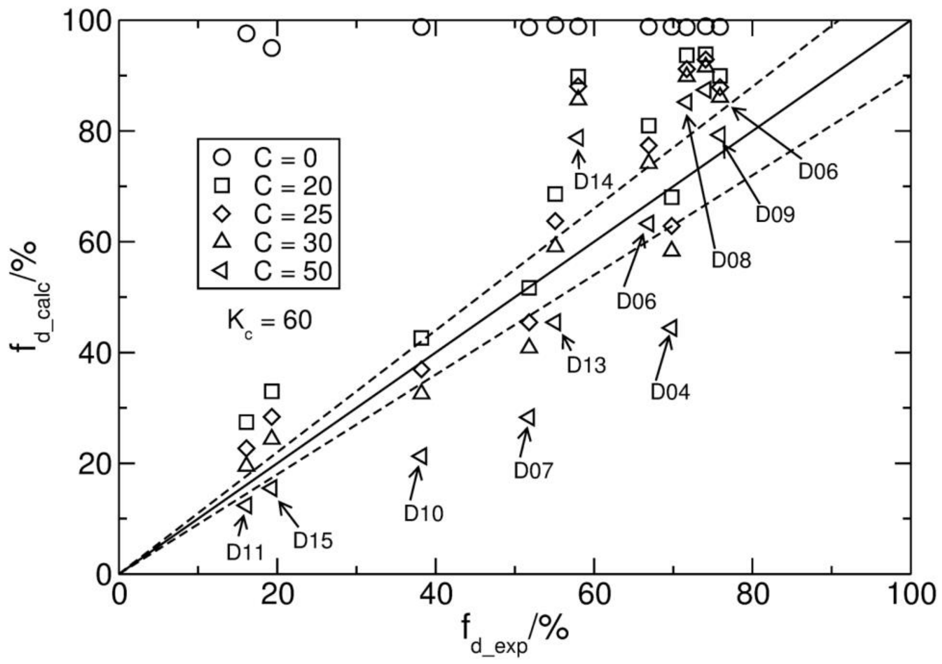


Abb. 3.4 Verhältnis von aus der Grube ausgetragener Masse zur Gesamtmasse in den Experimenten mit Wasser (Serie „D“) in Rechnung (y-Achse) und Experiment (x-Achse) bei Variation des Ablagerungsparameters C

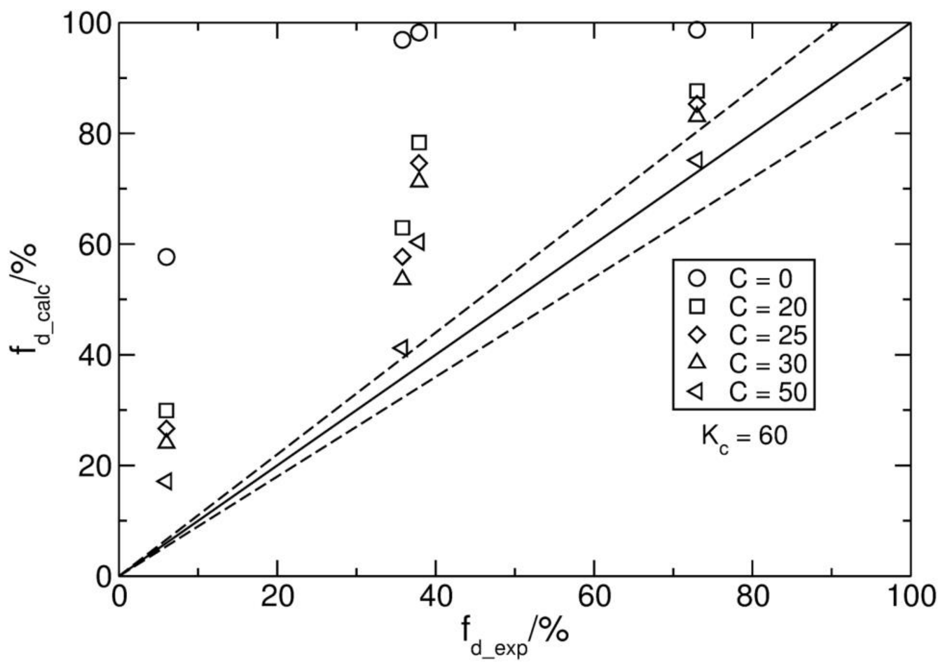


Abb. 3.5 Verhältnis von aus der Grube ausgetragener Masse zur Gesamtmasse in den Experimenten mit Woodschem Metall (Serie „D“) in Rechnung (y-Achse) und Experiment (x-Achse) bei Variation des Ablagerungsparameters C

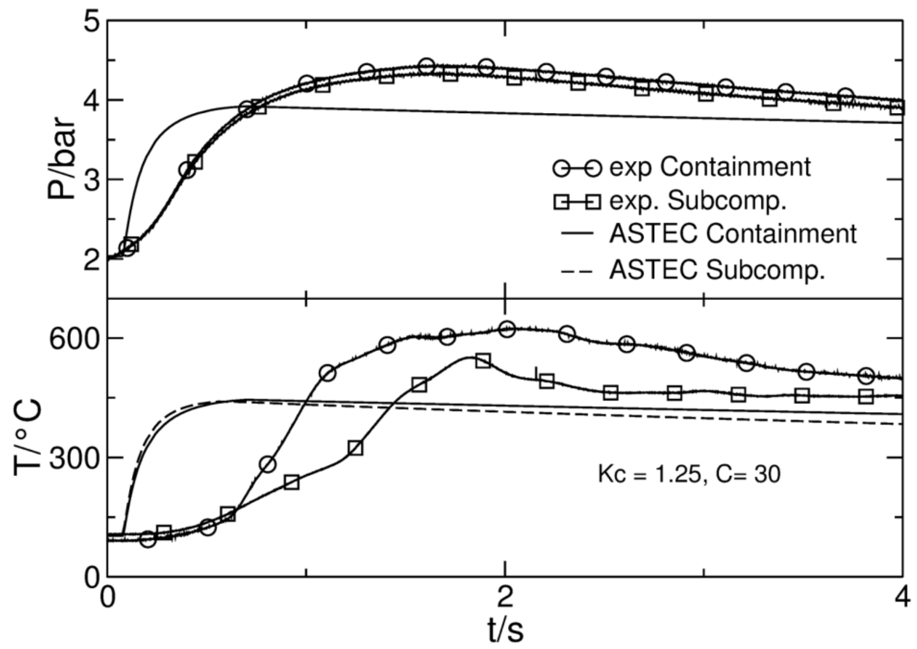


Abb. 3.6 Druck und Temperaturverhalten im Containment und Dampferzeugerräumen (Subcompartments) beim heißen Experiment H02 mit Thermitschmelze auf Eisen/Aluminiumoxid-Basis und Rechnung

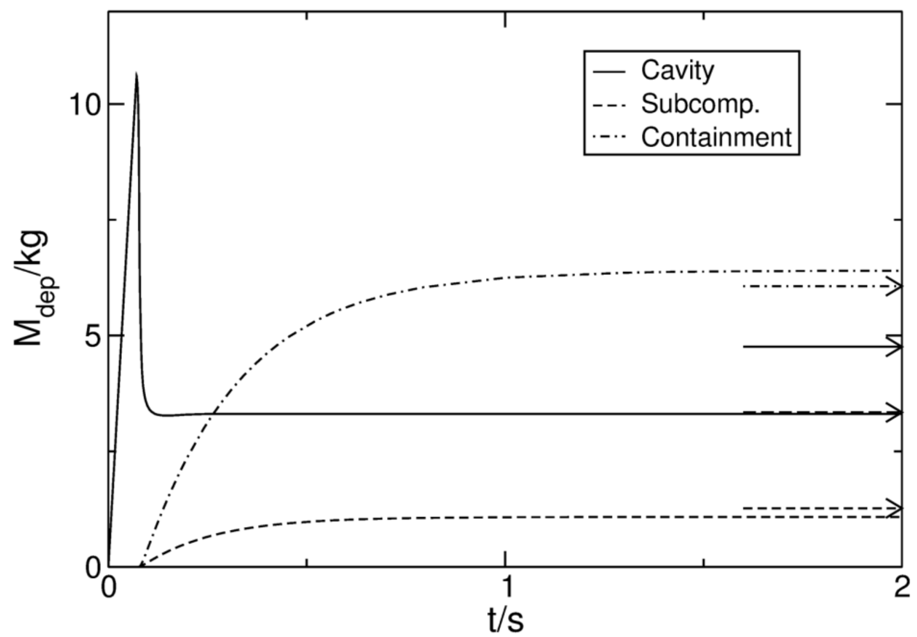


Abb. 3.7 Verteilung der abgelagerten Schmelzemasse auf Containment, Subcompartment und Reaktorgrube in Experiment H02 und Rechnung

Schlussfolgerungen

Für das ASTEC-Modell wurden ausgehend vom DCH-Modell in COCOSYS einige weitere konsequente Vereinfachungen von einigen Teilmodellen vorgenommen (z. B. monodisperse Größenverteilung, Ablagerung der luftgetragenen Partikel), die in Anbetracht der Zielsetzung des Codes ASTEC sowie der Komplexität der wirklichen Vorgänge gerechtfertigt erscheint. Der aktuelle Stand des DCH-Modells in ASTEC erlaubt Nachrechnungen von DISCO-Experimenten mit heißer Schmelze und reaktiver Atmosphäre, bei denen die wesentlichen Parameter für DCH in befriedigender Übereinstimmung mit dem Experiment simuliert werden. Das Modell ist sehr sensitiv, abhängig von zwei frei wählbaren Modellparametern, bei denen primär eine Abhängigkeit von der Anlagengeometrie unterstellt wurde. Dennoch zeigte sich in der Überprüfung scheinbar eine Abhängigkeit der Parameter von der Versuchsführung (heiße Schmelze in Serie „H" gegenüber kalter Schmelze in Serie „D" bzw. „M") bei gleicher Anlagengeometrie (EPR). Dies ist zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht verstanden und sollte zukünftig im Rahmen einer Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse (SUSA) weiter untersucht werden.

Weitere Aktionen, um das Modell im Ganzen korrekt an die bei IRSN derzeit in Überarbeitung befindlichen Module für die Kernzerstörung (CESAR/ICARE) bzw. für den Austrag von Schmelze und Gas aus dem RDB ins Containment (Modul RUPUICUV) anzubinden, wurden vorerst nicht eingeleitet. Stattdessen wurden – wie oben genannt – zunächst qualitätssichernde Maßnahmen (Modularisierung) durchgeführt und das Modell sauber in das Versionsablagesystem CVS für die Entwicklerversion eingepflegt.

3.3 Modellentwicklung für GEN-IV-Anlagen – Arbeiten im EU-Vorhaben JASMIN

Hintergrund

Von der EU werden gezielt Aktivitäten zur Entwicklung von Reaktorkonzepten der Generation IV gefördert, z. B. durch die „European Sustainable Nuclear Industrial Initiative" (ESNII) als Bestandteil der „Sustainable Nuclear Energy Technology Platform" (SNETP; http://www.snetp.eu/), an der sich auch die GRS beteiligt. Vom technologischen Standpunkt her betrachtet sind dabei die Konzepte für schnelle natriumgekühlte Reaktoren (SFR = Sodium Fast Reactor, siehe Abb. 3.9) der im Rahmen des GEN-IV-Projekts untersuchten Systeme am weitesten entwickelt. Derartige Reaktoren sind be-

reits in Frankreich, China, Deutschland, Indien, Japan, Großbritannien, Russland und USA gebaut worden oder in Planung.

Frankreich und Japan z. B. sind zurzeit stark in der Entwicklung von neuen SFR-Prototypen engagiert. Während im ASTRID-Projekt in Frankreich (von der CEA geleitet) ein großer Pool-Typ-Reaktor favorisiert wird (vgl. Abb. 3.8 linke Seite, Abb. 3.9), entwickelt Japan mit dem JSFR-1500 einen Loop-Typ-Prototypen (vgl. Abb. 3.8 rechte Seite). Weitere SFR-Prototypen sind in Indien, Russland und Korea geplant.

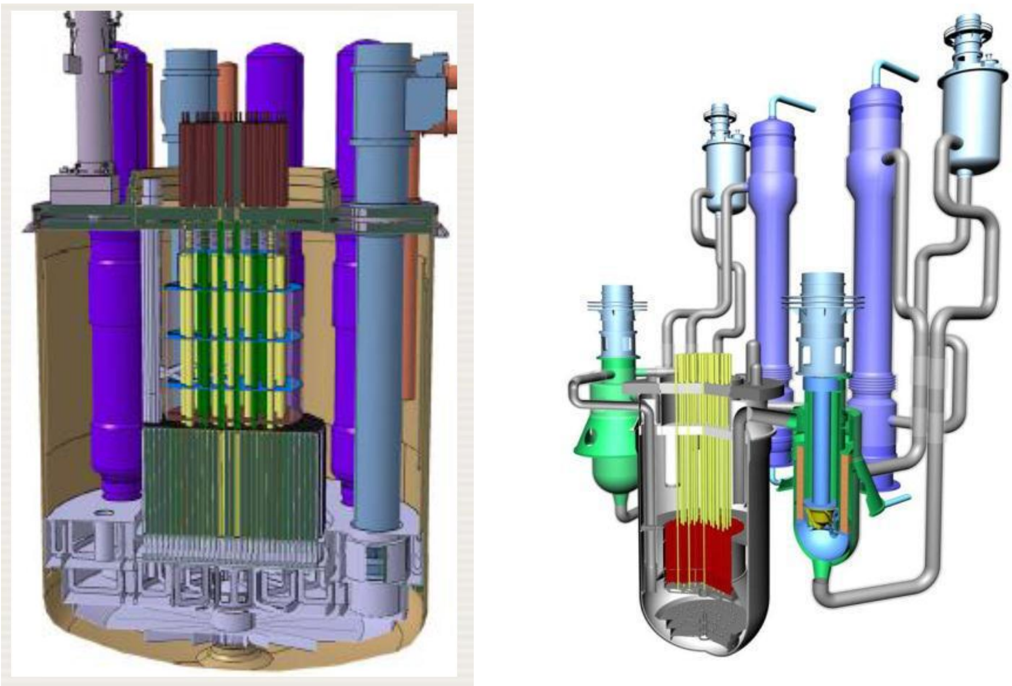


Abb. 3.8 Anordnung von Reaktor und Kühlkreislauf bei der Pool-Bauweise des franz. ASTRID-Projektes (links) und beim Loop-Typ-Konzept des japanischen JSFR-1500 (rechts) /MON 11/

Die GRS hat sich im Rahmen des EU-Vorhabens JASMIN, das sich unter Führung von IRSN mit der Erweiterung von ASTEC für die Anwendung auf SFR-Konzepte befasst, an der Entwicklung geeigneter Modelle für SFR beteiligt. Weitere internationale Partner dieses Projektes sind Uni Stuttgart, KIT Karlsruhe, AREVA Frankreich, EDF Frankreich, JRC Petten, CIEMAT Spanien, ENEA Italien.

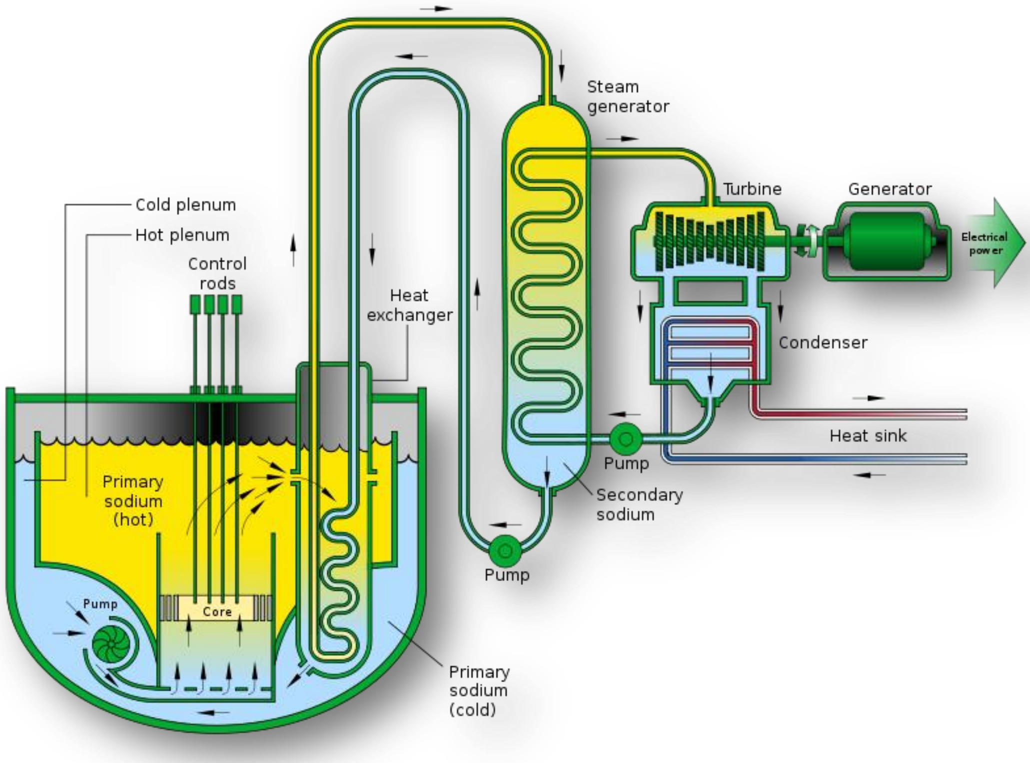


Abb. 3.9 Schematische Darstellung des Pool-Konzepts bei einem Sodium Fast Reactor (SFR) (http://www.gen-4.org)

Zielsetzung der Mitarbeit der GRS im JASMIN-Projekt ist es, vorhandene Modelle zu prototypischen Containment-Phänomenen von SFR-Anlagen einer Bewertung zu unterziehen, Entwicklungsbedarf für quelltermrelevante Modelle für Phänomene im Containment aufzuzeigen sowie erste Schritte zur Implementation fehlender Modelle in ASTEC-Na durchzuführen. Darüber hinaus bestand die Aufgabe, an der Aufstellung und Abarbeitung einer Validierungsmatrix mitzuwirken. Da noch keine konkreten Details eines Containment-Designs vorliegen, mussten die Arbeiten weitgehend generischer Natur sein.

Auswertung früherer GRS-Arbeiten zum SNR-300

Zunächst wurden die wesentlichen Erkenntnisse aus früheren Untersuchungen zum SNR-300 („Schneller Brüter“) zusammengetragen, an denen sich technisch-wissenschaftliche Sachverständigeneinrichtungen in Deutschland im Zeitraum von ca. Mitte der 70er bis ca. Ende der 80er Jahre beteiligten.

Bei dem SNR-300 handelte es sich um ein Loop-Design (Abb. 3.10). Die natriumführenden Komponenten des Primärsystems sind in den inertisierten (d. h. mit N_2 gefüllten) und mit Leckauffangwannen am Boden sowie mit Stahlverkleidung (Liner) an den Wänden ausgestatteten Räumen des inneren Containments (Legendeneintrag „7“ in Abb. 3.8) untergebracht. Das äußere Containment (Legendeneintrag „8“ in Abb. 3.8) umschließt das innere Containment und enthält die Anlagenräume für Hilfs- und Nebenanlagen.

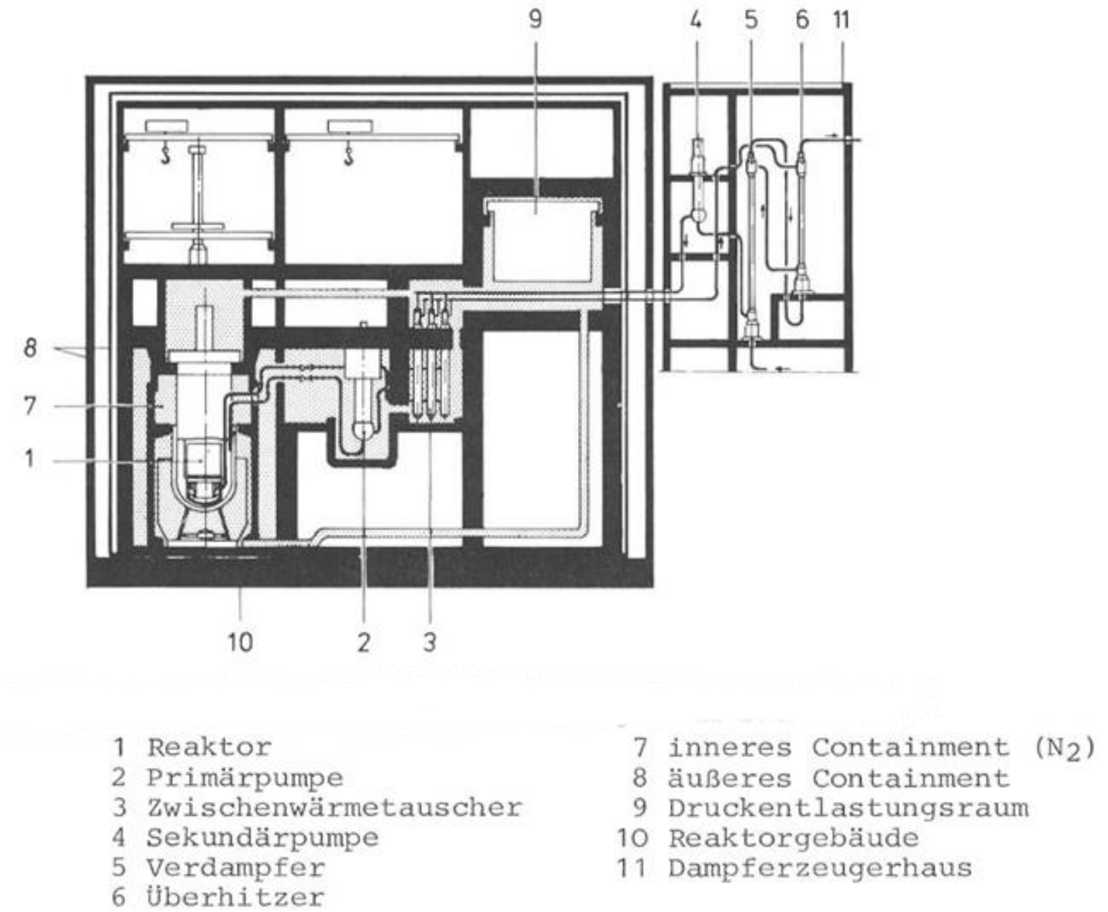


Abb. 3.10 Gebäude und Anlagenanordnung beim SNR-300 /GRS 82/

Im Rahmen einer von der GRS zusammengefassten, risikoorientierten Analyse zum SNR-300 /GRS 82/ wurden die Ereignisabläufe typischer Unfälle mit relativ gravierenden Auswirkungen durch die Analyse von ausgewählten repräsentativen Rechenfällen ausgewertet. Die Rechenfälle unterscheiden sich nach einleitendem Ereignis (Tab. 3.1), Verfügbarkeit von Systemen (Tab. 3.2) und Versagensart des Tanks (Tab. 3.1).

Tab. 3.1 Unterscheidung der Fälle in der risikoorientierten Analyse zum SNR-300 /GRS 82/ nach einleitendem Ereignis und Versagensart des Tanks

Abkürzung		Vorgang
Einleitendes Ereignis	UKDS	Unkontrollierter Kerndurchsatz (z. B. bei Ausfall Primärpumpen und Ausfall RESA nach Ausfall der Stromversorgung)
	UWVA	Unzureichende Wärmeabfuhr bei Versagen der Schnellabschaltung (z. B. bei Ausfall der Hauptwärmesenke)
	ANWA	Ausfall der Nachwärmeabfuhrsysteme bei abgeschaltetem Reaktor
Versagensart Tank	UTV	Thermisches Versagen des Tanks im unteren Bereich durch Schmelzestrahl (kleiner Auswurf)
	NWV	Spätes Tankversagen (umfangreiche Na-Verdampfung, niedriger Na-Spiegel)
	MTV2	Versagen der Mischnaht im oberen Tankbereich
	MDV2	Versagen des Tankdeckels, Zerstörung der Tankzellenabdeckung

Tab. 3.2 Verfügbarkeit der Systeme in den typischen Rechenfällen in der risikoorientierten Analyse zum SNR-300 /GRS 82/.

Fall Nr.	Einleitungsereignis	Tankversagen	Systemausfälle						
			Inneres Containment			Äußeres Containment			
			Bodenkühlung	Stickstoffnaturumlauf	Dampfdruckentlastungssystem	Containmentabschluss	Kühlung im äußeren Containment	Reventingsystem	Exventingsystem
1	UKDS	UTV	+	+	+	+	+	+	+
2	UKDS	UTV	+	+	+	–**	+	○	○
3	UWVA	NWV	–	+	–	–*	–	–	–
4	UWVA	MTV2	–	–	–	–*	–	–	–
5	ANWA	NWV	–	+	–	+	–	–	–
6	ANWA	NWV	–	+	–	–**	–	–	–
7	ANWA/UWVA	MTV2	–	–	–	+	–	–	–
8	UKDS	MDV2	–	○	–	+	–	–	–

+ = System funktioniert; ○ = System nicht relevant; – = System ausgefallen

*Abluftbetrieb (Containmentabschluss); **Klappen schließen nicht (Containmentabschluss)

Für die Abläufe im Containment stellt der Rechenfall 5 ein komplexes Szenario dar. Auslösendes Ereignis ist der unbeherrschte Notstromfall. Das Reaktorschutzsystem löst zwar erfolgreich eine Abschaltung des Reaktors aus. Es wurde jedoch ein Ausfall aller aktiven Kühlsysteme unterstellt. Dies betrifft auch das Nachwärmeabfuhrsystem und die aktive Kühlung der Bodenkühleinrichtung (externer Kernfänger) unter dem Reaktortank. Infolge der fehlenden Nachwärmeabfuhr kommt es zu einer Kernzerstörung. Der Reaktortank versagt infolge eines Niederschmelzen des Kerns nach einem Ausdampfen eines Teils des Natriums im Tank. Der Brennstoff lagert sich in die Bodenkühleinrichtung um, das flüssige Natrium sammelt sich in der Auffangwanne im inneren Containment. Es kommt zu einem weiteren Natriumsieden im inneren Containment. Während des Natriumsiedens heizt sich die Atmosphäre des inneren Containments auf Temperaturen nahe des Siedepunktes von Natrium (890 °C) auf. Bei diesen Temperaturen kann bereits ein Versagen des aufgeheizten Liners durch den Dampfdruck infolge ausdampfenden Betons hinter dem Liner erfolgen. Ein Versagen des Liners erfolgt spätestens nach thermischem Versagen der Tragkonstruktion für die Bodenkühleinrichtung am Boden nach ca. 25 h. Mit Versagen des Liners verliert das innere Containment seine Inertisierung. Es kommt zu Natrium/Dampf-Reaktionen, Natrium/Beton-Wechselwirkung, Brennstoff/Beton-Wechselwirkung. Nach ca. 170 h spricht das Sicherheitsventil des inneren Containments an. Die Spaltproduktfreisetzung an die Umgebung hängt nun von der Funktion des Containmentabschlusses und von evtl. Leckagen in der Hülle des äußeren Containments ab.

Für die Thermohydraulik im inneren Containment, wo zeitweilig das Verdampfen von Natrium eine bedeutende Rolle spielt, wurde in /GRS 82/ der Code NACON verwendet. NACON beschreibt die Abfuhr eines Teils der in der Bodenkühleinrichtung frei werdenden Nachwärme durch das NaK-System, den Übergang des restlichen Teils der Nachwärme in den Natriumpool in der Auffangwanne, den Wärmetransport im Natrium zwischen Brennstoff und Auffangwanne, die Wärmestrahlung von der Natriumoberfläche an Strukturen, die Verdampfung und Kondensation von Natrium sowie den Naturumlauf im inneren Containment.

Basierend auf der Auswertung von /GRS 82/ und weiteren früheren Arbeiten der GRS zum SNR-300 (siehe zugeordnete Referenzen unten) wurden zusammenfassend folgende Phänomene im Containment als besonders relevant identifiziert:

- Natrium-Sieden und -Verdampfen /LAN 86, LAN 86b, LAN 90/
- Natriumbrände (Lachenbrand, Spritzbrand) /BOE 82, LAN 91/

- Verhalten von Natriumbrandaerosolen Na_2O_x /MOR 85, FRI 93/
- Natrium-Beton-Wechselwirkung /BOE 82/
- Wasserfreisetzung aus dem einseitig aufgeheizten Beton /BOE 86, LAN 90/

Die früheren Arbeiten der GRS zur Verbesserung von Einzelmodellen zu SFR-Containment-Phänomenen konzentrierten sich damals auf die Erprobung, Verbesserung und Bewertung der ersten, auf natriumgekühlte schnelle Reaktoren erweiterten Versionen des U.S. Containmentcodes CONTAIN. Diese noch gemeinsame Entwicklungslinie des CONTAIN-Codes für leichtwasser- und natriumgekühlte Reaktoren mündete Ende der 80er Jahre in die Separation der zwei Entwicklungsstränge: CONTAIN (für LWR) und CONTAIN-LMR.

Bei der GRS liegt zurzeit CONTAIN in der Version V2.0 vor, welches im FORTRAN-Code Modelle zur Natrium-Thermohydraulik und zu Natriumbränden enthält, obwohl die Version offiziell für LWR erstellt wurde. Die Weiterentwicklung von CONTAIN-LMR wurde gegen Ende der 80er Jahre nicht mehr von dem Hauptentwickler, Sandia National Laboratories SNL, sondern unkoordiniert u. a. in Japan und Deutschland (am Karlsruher Institut für Technologie KIT) weitergeführt. Dort liegen zurzeit vermutlich unterschiedliche CONTAIN-LMR-Versionen vor.

Erprobung von natriumspezifischen Modellen in CONTAIN

Die aktuell bei der GRS im vorhandenen CONTAIN-Code vorliegenden Natriummodelle wurden grundsätzlich auf Ablauffähigkeit hin untersucht und erprobt.

- **Natriumsieden**

Der Rechenfall 5 aus /GRS 82/ in Tab. 3.2 stellt die Bedeutung von Siede- und Kondensationsvorgängen heraus. In /LAN 86b/ wurde die damals bei der GRS vorliegende CONTAIN-Version V1.03 in Bezug auf das Phänomen des Natriumsiedens im Vergleich zu eigenen thermohydraulischen Berechnungen (Rechenprogramm SIED /LAN 86/) an einfachen Testbeispielen überprüft. Bei dem Testfall handelt es sich um einen Natriumpool von 1000 kg bei einer Anfangstemperatur von T_0 = 870 °C nahe der Siedetemperatur von Natrium. Der Natriumpool befindet sich in einem mit Stickstoff gefüllten Raum von 1000 m^3 bei einer Anfangstemperatur von 20 °C und einem Druck von 1 bar. Im Natriumpool wird dauerhaft eine Leistung von 20 MW freigesetzt.

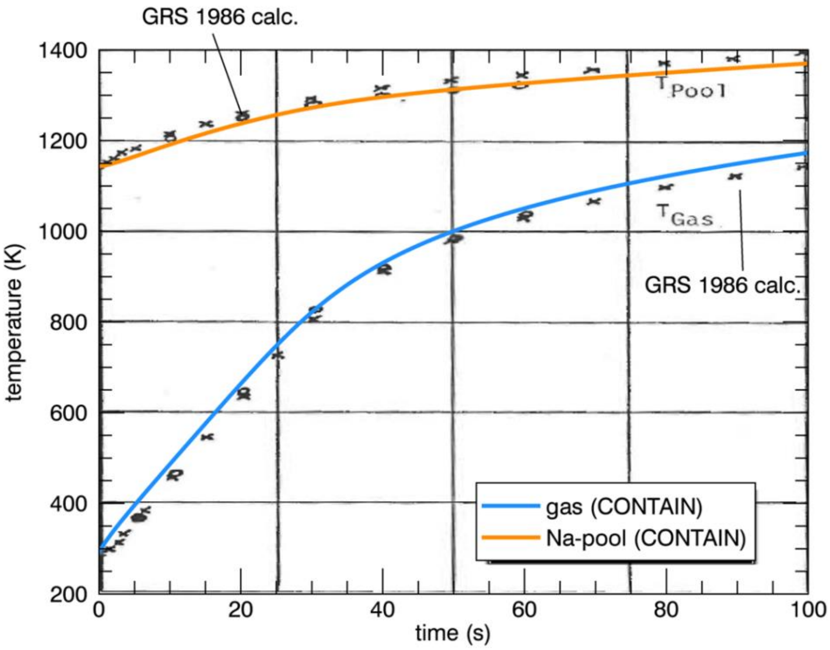


Abb. 3.11 Reproduktion der Natriumpool- und der Gastemperatur für den akademischen Testfall zum Natriumsieden; farbige Linien: CONTAIN V2 (2014), Kreuze: GRS-Rechencode SIED (1986), Kreise: CONTAIN 1.03 (1986)

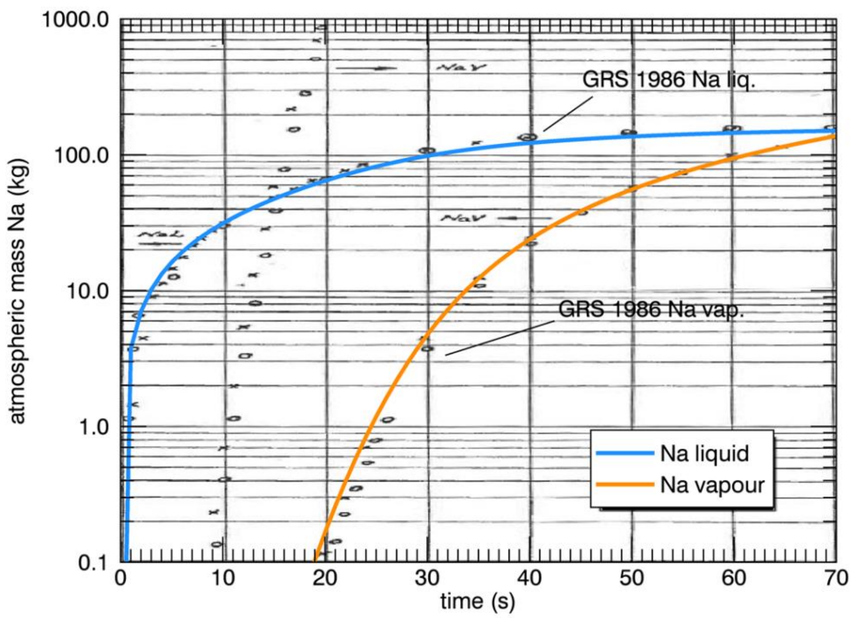


Abb. 3.12 Reproduktion der atmosphärischen Natriummassen (gasförmig/flüssig) für den akademischen Testfall zum Natriumsieden mit CONTAIN V2; farbige Linien: CONTAIN V2 (2014), Kreuze: GRS-Rechencode SIED (1986), Kreise: CONTAIN 1.03 (1986)

Die gute Reproduktion der Ergebnisse aus /LAN 86b/ in Abb. 3.11 und Abb. 3.12 zeigt die prinzipielle Eignung der bei der GRS vorliegenden CONTAIN-Version in Bezug auf zukünftige Test- und Validierungszwecke zur Natrium-Thermohydraulik für ASTEC-Na.

- **Natrium-Lachenbrände im geschlossenen Behälter bei FAUNA 5 und FAUNA 6**

Natrium ist bis zu 97.7 °C fest. Erwärmtes flüssiges Natrium entzündet sich in trockener Luft und bildet Natriumperoxid Na_2O_2 und -monoxid Na_2O:

$$2\,Na + 1/2\;O_2 \rightarrow Na_2O \tag{3.12}$$

$$2\,Na + O_2 \rightarrow Na_2O_2 \tag{3.13}$$

Bei Temperaturen oberhalb von 733 K (1 bar) zerfällt Natriumperoxid wieder:

$$Na_2O_2 \rightarrow Na_2O + 1/2\,O_2 \tag{3.14}$$

In Deutschland wurden Natriumlachenbrände im Rahmen der FAUNA-Testserie beim Karlsruher Institut für Technologie untersucht /CHE 83, CHE 90/.

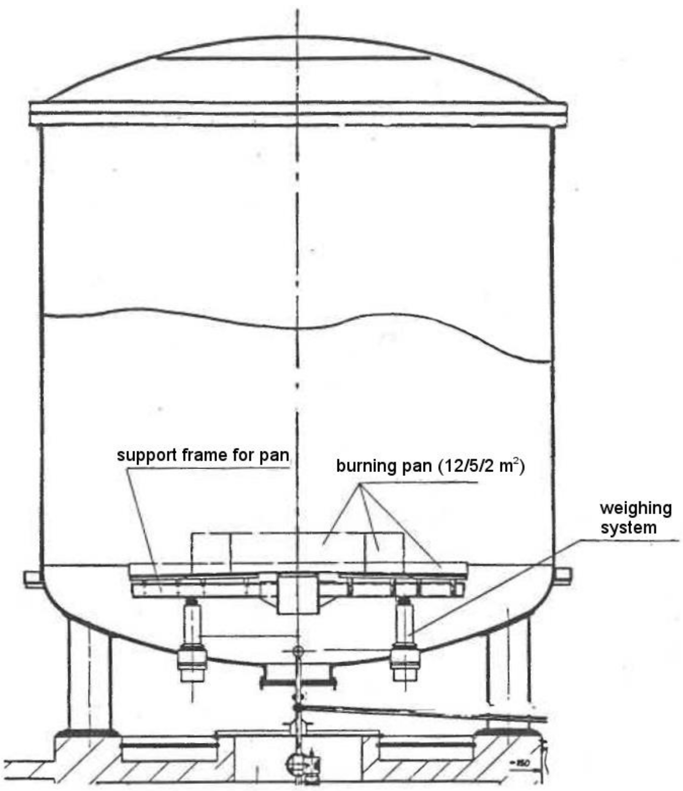


Abb. 3.13 Versuchsbehälter für die Natrium-Lachenbrände in der FAUNA-Anlage /CHE 83/

Die Natrium-Lachenbrände sind zwischenzeitlich mit verschiedenen CONTAIN-Versionen nachgerechnet worden: CONTAIN V1.1x (bei GRS /LAN 91/), CONTAIN-LMR und SOFIRE-II (bei z. B. KIT /HER 11/). In diesen Analysen wurden Einraum-Modelle des Testbehälters mit feineren Diskretisierungen (z. B. einem 32-Zellen-Modell) verglichen.

Mit der aktuell bei der GRS vorliegenden CONTAIN-Version V2.0 wurden Nachrechnungen zu den Versuchen FAUNA 5 und 6 wiederholt. Diese beiden Versuche wurden ausgewählt, da während des Natriumbrandes der Versuchsbehälter in diesen beiden Versuchen zeitweilig (~ 60 min) geschlossen war und ein entsprechender Druckaufbau gemessen wurde, der mit der Rechnung verglichen werden kann. In beiden Experimenten kam eine auf ca. 450 °C aufgeheizte Natriummasse von 350 kg in der Brandpfanne zum Einsatz. Es wurde angenommen, dass die Struktur der Brandpfanne selbst ebenfalls auf Natriumtemperatur aufgeheizt war. Die Querschnittsfläche der Brandpfanne betrug 2 m^2 in FAUNA 5 und 5 m^2 in FAUNA 6. Während der Anfangsphase von bis zu ca. 20 min Dauer, in der das flüssige Natrium in die Brandpfanne eingefüllt wurde, lag eine Kombination aus Spritz- und Lachenbrand in den Experimenten vor.

Folgende Annahmen wurden vereinfachend getroffen:

- Nur das Lachenbrandmodell kam zum Einsatz. Der Einfluss eines Spritzbrandes zu Beginn wurde vernachlässigt.
- Die Wärmeverluste zwischen Brandpfanne (aus 100 kg Stahl) und dem unteren Behälterbereich wurden vernachlässigt, obwohl die Brandpfanne in FAUNA 5 und 6 nicht beheizt und nicht isoliert war.
- Ein Wärmeübergang zwischen der Atmosphäre und dem Behälterboden wurde nicht berücksichtigt. Wärmestrukturen waren nur für die Seitenwand und den Deckel des Behälters vorgegeben. Diese Annahme basiert auf dem Vergleich der Rechnungen mit dem Einraum-Modell und dem 32-Raum-Modell in /LAN 91/, aus dem hervorgeht, dass der Wärmeübergang nach unten vernachlässigt werden sollte.
- Da die Atmosphäre sehr schnell mit luftgetragenen Brandaerosolen beladen wird, wird der Strahlungswärmeaustausch zwischen Natriumoberfläche und Behälterwänden nicht berücksichtigt. Nur konvektiver Wärmetransport zwischen Natriumoberfläche, Atmosphäre und Behälterwänden wird berücksichtigt. Für den Wärme-

übergang zwischen Natriumpool und Atmosphäre wird ein empirischer Wärmeübergangskoeffizient von 25 W/(m^2 K) /LAN 91/ angesetzt.

– 70 % (= Lachenbrandparameter f2) der Reaktionsenergie beim Lachenbrand wird in den Natriumpool freigesetzt. Der Rest wird in die Atmosphäre eingespeist.

– Ein Anteil von 15 % (= Lachenbrandparameter f1) des Sauerstoffverbrauchs wird für die Produktion des Natriummonoxids, Na_2O, im Gegensatz zum Peroxid, Na_2O_2, verwendet.

Das Lachenbrandmodell, das aus dem SOFIRE-II-Code abgeleitet ist, berechnet den Natriumverbrauch $\dot{m}_{\mathrm{Na}}$ nach folgender Gleichung

$$\dot{m}_{\mathrm{Na}} = -A_{pool}\, H_g\, \rho_g\, \frac{m_{O2}}{m_g}\, S \qquad (3.15)$$

A_{pool}	Querschnittsfläche des Pools
ρ_g	Dichte des Gases in der Atmosphäre
m_{O2}/m_g	Sauerstoffkonzentration in der Atmosphäre
S	Massenverhältnis von verbrauchtem Natrium zu verbrauchtem Sauerstoff

S wird durch den Modellparameter f1 festgelegt. Eine wichtige Einflussgröße ist hierin der Gastransportkoeffizient H_g, der mit dem Gasdiffusionskoeffizienten D, der Schmidt-Zahl Sc, dem thermischen Ausdehnungskoeffizienten β, der kinematischen Viskosität im Gas ν sowie mit der Temperaturdifferenz $T_{\mathrm{Na}} - T_g$ zwischen Natriumpooloberfläche und Gas zusammenhängt:

$$H_g = 0{,}14\, D \left(g\, Sc\, \frac{\beta}{\nu^2} \left(T_{\mathrm{Na}} - T_g \right) \right)^{1/3} \qquad (3.16)$$

Die Brandrate steigt demnach mit der Temperaturdifferenz $T_{\mathrm{Na}} - T_g$, die mit dem Parameter f_2 zunimmt und mit besserem Wärmeübergang zwischen Natriumpool und Atmosphäre abnimmt. Diese Abhängigkeiten konnten in Nachrechnungen auch klar reproduziert werden (Abb. 3.14, Abb. 3.15).

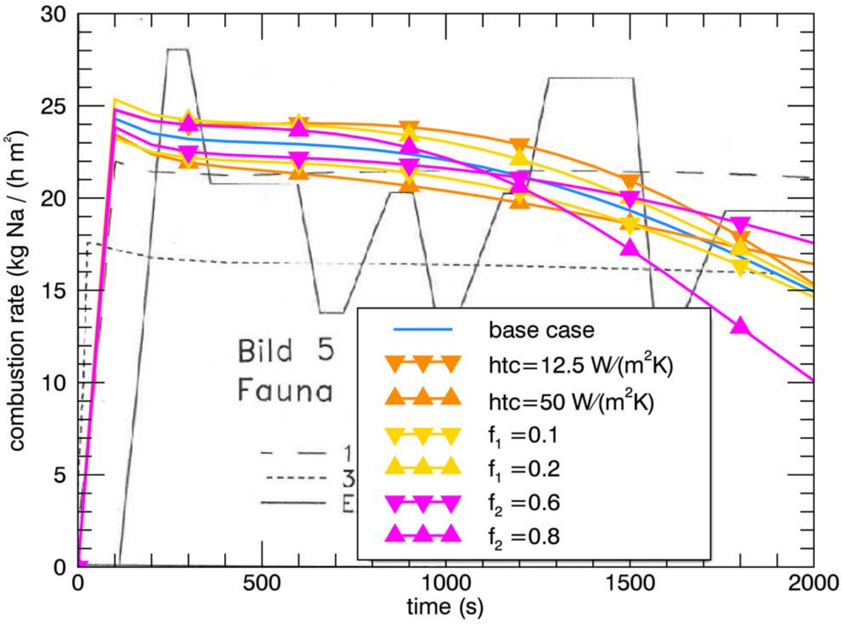


Abb. 3.14 Berechnete Brandrate für FAUNA 5 im Vergleich zum Experiment und Einfluss von Modellparametern; „Base case“: Wärmeübergangskoeffizient (htc) zwischen Pool und Atmosphäre = 25 W/(m^{2}K), f_1 = 0.15, f_2 = 0.7.

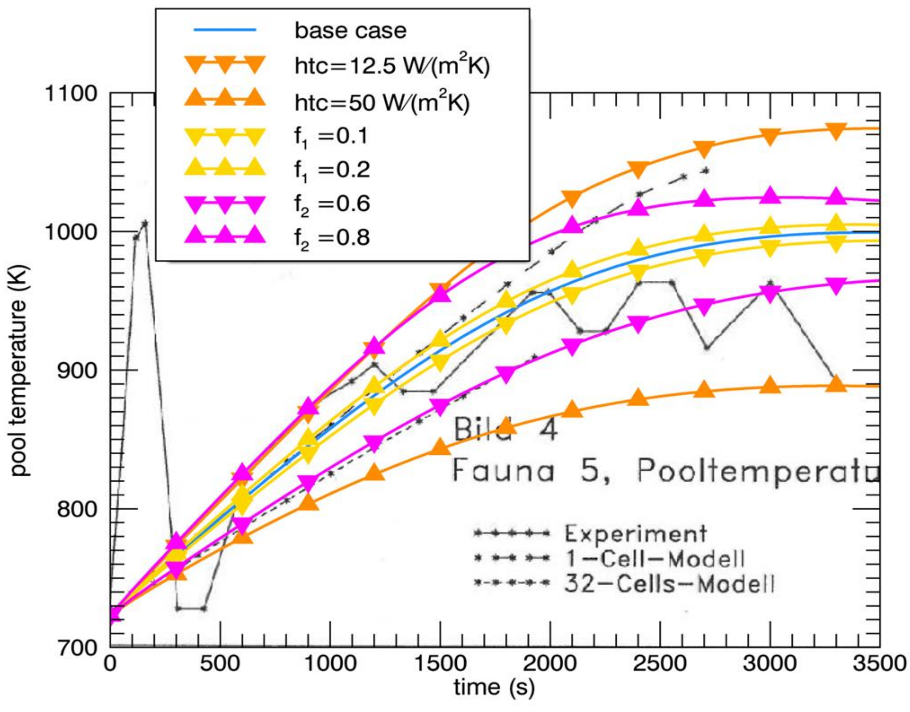


Abb. 3.15 Berechnete Natriumpooltemperaturen für FAUNA 5 im Vergleich zum Experiment und Einfluss von Modellparametern; „Base case“: Wärmeübergangskoeffizient (htc) zwischen Pool und Atmosphäre = 25 W/(m^{2}K), f_1 = 0.15, f_2 = 0.7

- **Natrium-Lachenbrände im offenen Behälter/Aerosolverhalten bei FAUNA 1**

Der wesentliche Unterschied zwischen FAUNA 1 und FAUNA 5 bestand darin, dass bei FAUNA 1 zwischenzeitlich Sauerstoff in die Anlage eingespeist wurde. In beiden Experimenten kam eine Brandpfanne mit einer Fläche von 2 m^2 zum Einsatz. In FAUNA 1 wurde in diese 150 kg Na eingespeist, von denen nur ca. 110 kg reagiert haben. Der Grund für die unvollständige Verbrennung ist die immense Beladung der Zone direkt oberhalb der Pooloberfläche mit Verbrennungsprodukten, die sich auch auf der Pooloberfläche ablagern (Verkrustung) und die Verbrennung ersticken. Diese detaillierten Vorgänge werden aber von dem in CONTAIN implementierten Modell nicht erfasst. Für die Nachrechnung von FAUNA-1 wurden folgende Annahmen getroffen:

– Als anfängliches Natriuminventar wurde in der Nachrechnung von FAUNA 5 die tatsächlich verbrannte Masse von 110 kg anstelle der experimentellen Masse von 150 kg verwendet, weil das vorzeitige Ersticken der Verbrennung durch Verbrennungsprodukte nicht modelliert ist.

– Die Einspeisetabelle für den Sauerstoff wurde an die verfügbaren Messdaten für die Sauerstoffkonzentration angepasst.

– Um die Aerosolablagerung am Boden zu berücksichtigen, wurde eine zusätzliche, dünne Struktur definiert.

– Der Lachenbrandparameter f1 wurde an experimentelle Auswertungen angepasst, die besagen, dass die nach Ende des Versuchs vorgefundenen Reaktionsprodukte in der Pfanne im Verhältnis von 40 : 60 (Na_2O_2 zu Na_2O) stehen. Daraus wurde ein Parameter f_1 = 0,45 abgeleitet. Die berechneten verbliebenen Massen von Na_2O_2 und Na_2O stimmen dann gut mit den experimentellen Werten überein.

– Der Lachenbrandparameter f4 (Verhältnis der Peroxidmasse, die nach der Verbrennung in den Pool gelangt zur Masse des Peroxids, die als Aerosol in die Atmosphäre freigesetzt wird) wurde an experimentelle Daten der Natriumkonzentration in den luftgetragenen Aerosolen angepasst während des Brandes: f_4 = 0,8.

– Der Agglomerationsformfaktor γ wurde an den absteigenden Ast der Natriumkonzentration in den luftgetragenen Aerosolen nach Ende des Brandes angepasst. γ = 2,5.

– Der dynamische Formfaktor χ wurde in Übereinstimmung mit empfohlenen Werten in der Literatur /CHE 83, CHE 90/ angesetzt: χ = 1,1.

– Die Beheizung der Brandpfanne wurde nicht modelliert. Es wurden keine Wärmeverluste von der Pfanne nach unten berücksichtigt.

– Wie bei FAUNA 5 und 6 wurde Wärmetransport durch Strahlung nicht betrachtet.

– Für die Größenklassenverteilung der Brandaerosole wurde in Übereinstimmung mit der Literatur /CHE 83/ ein mittlerer Partikeldurchmesser von 0,89 μm mit einer Standardabweichung von 2 angenommen.

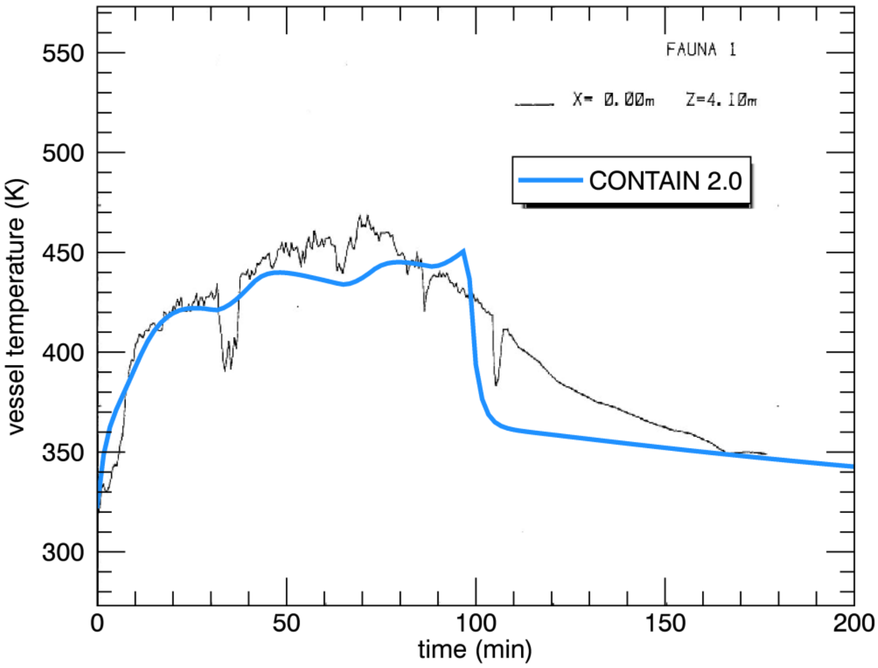


Abb. 3.16 Mit CONTAIN berechnete Temperatur im Behälter für FAUNA 1 (farbige Linie) im Vergleich zum Experiment (schwarze Linie)

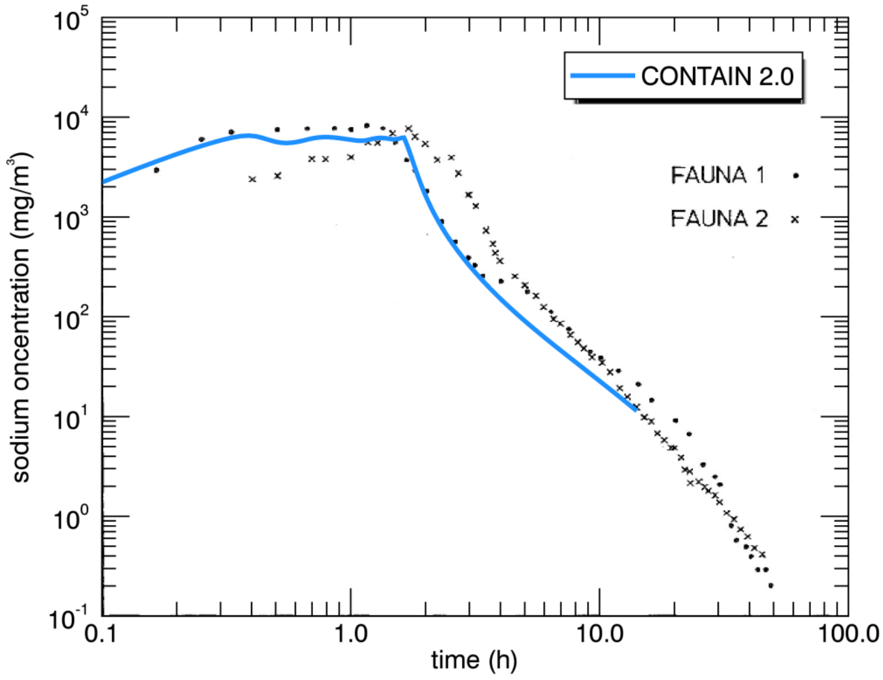


Abb. 3.17 Mit CONTAIN berechnete Natriumkonzentration im Behälter für FAUNA 1 (farbige Linie) im Vergleich zum Experiment (schwarze Kreise)

- **Aerosolverhalten**

Das Aerosolverhalten von Natriumbrandaerosolen geringer Konzentration in feuchter Atmosphäre wurde im ABCOVE-Versuch AB-7 untersucht /HIL 85, FRI 93/.

Das Monoxid bzw. das Peroxid kann unter diesen Bedingungen mit der Luftfeuchtigkeit weiter zu Natriumhydroxid reagieren:

$$Na_2O + H_2O \rightarrow 2\ NaOH \tag{3.17}$$

$$Na_2O_2 + 2\ H_2O \rightarrow 2\ NaOH + 1/2\ \ O_2 \tag{3.18}$$

Die Reaktion von Natrium mit der Luftfeuchtigkeit kann auch direkt erfolgen:

$$Na + H_2O \rightarrow\ \ NaOH + 1/2\ \ H_2 \tag{3.19}$$

In diesem Versuch wurden die Aerosole durch einen kleinen Natrium-Lachenbrand erzeugt. Dabei entstand aufgrund der geringen Menge eingesetzten Natriums durch Reaktion mit der Luftfeuchtigkeit im Behälter am Ende ausschließlich NaOH und praktisch kein Na_2O_2.

Für die Nachrechnung mit der bei der GRS aktuell vorliegenden CONTAIN-Version wurden folgende Annahemen getroffen:

- Die Geometrie (Volumen, Oberflächen und Wärmeleitungsstrukturen) wurde in Übereinstimmung mit offener Literatur /HIL 85, FRI 93, HER 13/ vorgegeben.
- In der vorliegenden CONTAIN Version V2.0 wird die Produktion von NaOH in der Gasphase ausschließlich über die Reaktion $Na_2O + H_2O \rightarrow 2\ NaOH$, Gl. (3.17), modelliert. Aus diesem Grunde wird der Lachenbrandparameter $f_1 = 1$ gesetzt (d. h. ausschließliche Produktion von Na_2O beim Lachenbrand), damit eine vollständige Umwandlung der Brandaerosole zu NaOH errechnet werden kann. Gl. (3.18) ist nicht modelliert.
- In /HER 13/ wurde angenommen wurde, dass nur ca. 1,9 kg (= 30 % der anfänglichen Natriummasse in der Lache, vgl. /HIL 85/) reagieren und luftgetragene Aerosole produzieren, so dass insgesamt 3,3 kg an Brandaerosolen, die zu 100 % aus NaOH bestehen, in die Atmosphäre eingetragen werden. In Übereinstimmung zu dieser Annahme wird die Natriummasse in der Lache, die vollständig verbrennt, gleich 1,9 kg gesetzt und der Lachenbrandparameter $f_4 = 0$ gesetzt, d. h. das gesamte, beim Brand produzierte Monoxid wird in die Atmosphäre als Aerosol freigesetzt.
- Die Aerosolparameter werden in Übereinstimmung zu /HER 13/ gewählt: Mittlerer Aerosoldurchmesser = 0.54 mm, geometrische Standardabweichung = 2.
- Da in ABCOVE 7 nur eine niedrige Aerosolkonzentration in der Atmosphäre erzielt wurde, hat der mittlere Aerosoldurchmesser einen dominanten Einfluss auf das Aerosolverhalten während der Brandphase: Der Durchmesser wächst nur langsam durch Agglomeration an. Agglomerationsformfaktor $\gamma = 1$; dynamischer Formfaktor $\chi = 1$.
- In der Rechnung wird ein vollständiger Abbrand der 1,9 kg Na bereits nach 200 s berechnet, was um einen Faktor 3 schneller ist als im Experiment (ca. 600 s).

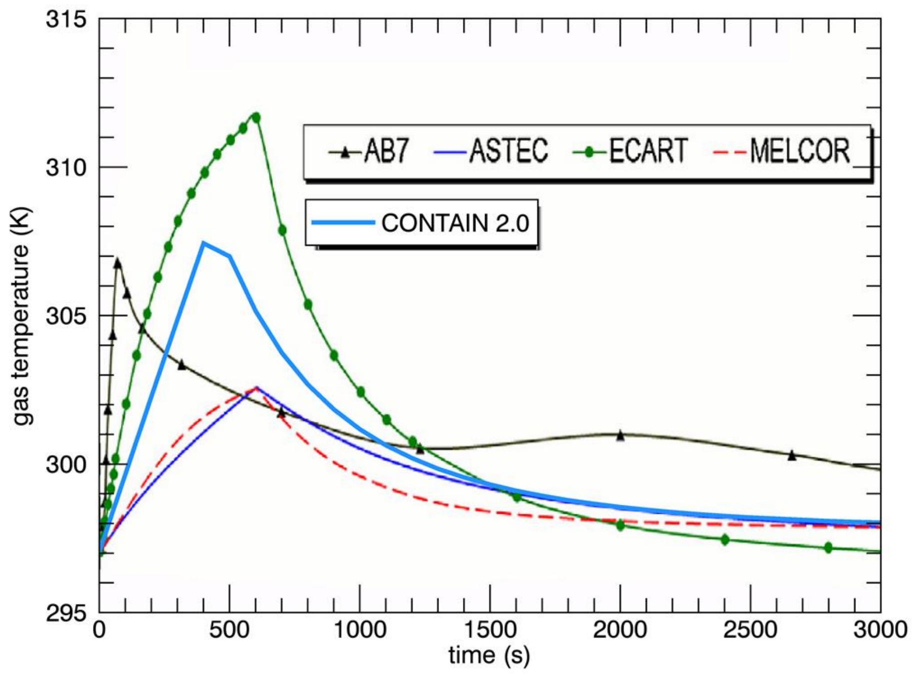


Abb. 3.18 Mit CONTAIN berechnete Gastemperaturen für ABCOVE 7 unter Einbezug des Lachenbrandmodells im Vergleich zu einem Benchmark zwischen ASTEC, ECART, MELCOR bei dem Aerosole und Energie des Lachenbrandes als Einspeisetabellen vorgegeben wurden

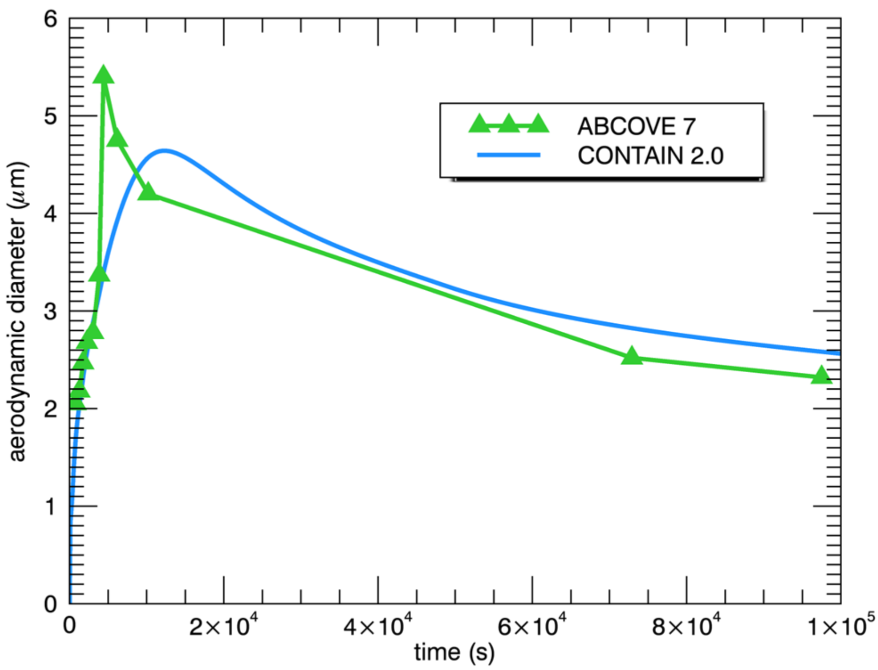


Abb. 3.19 Mit CONTAIN berechnete Entwicklung des mittleren Aerosoldurchmessers für ABCOVE 7 unter Einbezug des Lachenbrandmodells

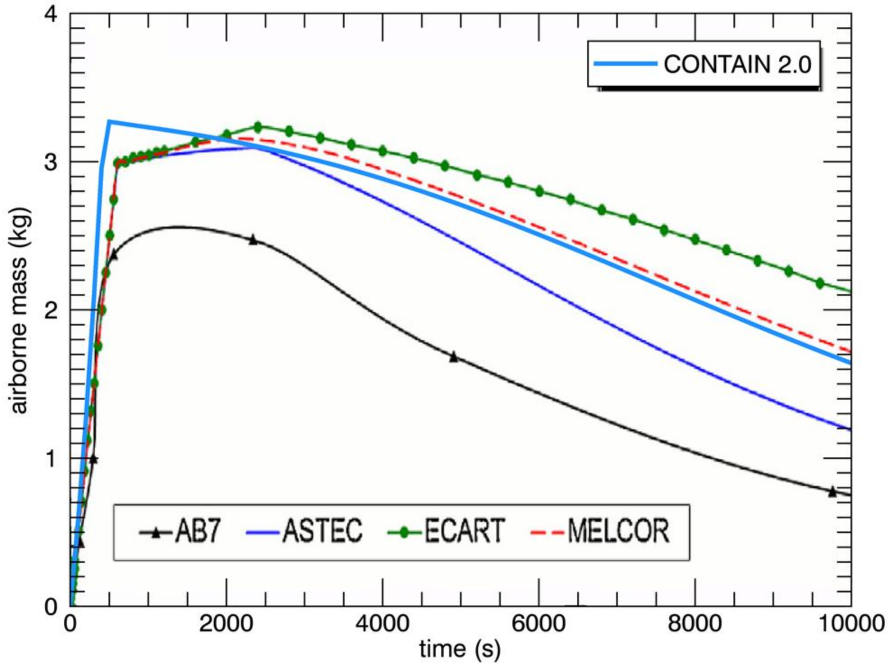


Abb. 3.20 Mit CONTAIN berechnete luftgetragene Aerosolmasse für ABCOVE 7 unter Einbezug des Lachenbrandmodells im Vergleich zu einem Benchmark /HER 13/ zwischen ASTEC, ECART, MELCOR bei dem Aerosole und Energie des Lachenbrandes als Einspeisetabellen vorgegeben wurden

Schlussfolgerungen aus der CONTAIN-Erprobung

Zu den untersuchten Phänomenen Natrium-Sieden, Natrium-Lachenbrand und Aerosolverhalten hält CONTAIN in der der GRS vorliegenden Version V2.0 eine nach derzeitigem Ermessen ausreichende Modellpalette bereit, um entsprechende Modellspezifikationen für ASTEC-Na abzuleiten sowie zukünftige Versionen von ASTEC-Na zu validieren. Viele Unsicherheiten sind mit der geeigneten Wahl von einflussreichen Modellparametern verbunden.

– Die Vereinfachungen bei der Darstellung der Vorgänge in der Brandzone bei einem Lachenbrand sind grob, aber angemessen. Die komplexen thermischen Wechselwirkungen zwischen der Oberfläche der Natriumlache, Aerosolen und der Atmosphäre in der Brandzone werden in der Nachrechnung auf einen effektiven Wärmeübergangskoeffizienten sowie eine Korrelation für die Natriumbrandrate zurückgeführt. Die Verteilung der Reaktionswärme auf Lache und Atmosphäre wird durch einen Eingabeparameter festgelegt. Mit der Wahl weiterer Lachenbrandparameter wird die Speziation der Reaktionsprodukte beeinflusst. Hier sind Ergän-

zungen bei den chemischen Reaktionen wünschenswert, sodass sich z. B. die ausschließliche Bildung von NaOH in feuchter Atmosphäre, wie bei ABCOVE AB-7, inhärent durch die modellierten Reaktionen ergibt und nicht durch Wahl entsprechender Eingabeparameter.

- Die Dauer des Lachenbrandes wird in der Rechnung durch Vorgabe einer reagierenden Natriummasse und durch die Korrelation für die Brandrate beeinflusst, während in der Realität der Brand durch das Zusetzen der Lachenoberfläche mit Reaktionsprodukten erstickt wird. Der Eingabeparameter für die Natriummasse in der Lache ist somit kritisch für die Nachrechnung von entsprechenden Experimenten.

- Für die mechanistische Analyse von Unfallszenarien bei SWR ist auch die Natrium-Thermohydraulik unter Einbezug der Siedefähigkeit bzw. Kondensierbarkeit von Natrium von Bedeutung. Eine grundlegende Erweiterung von CPA in Bezug auf diese Eigenschaften geht allerdings über den Rahmen von JASMIN hinaus.

- Modelle zum Austritt von Wasser aus einseitig erhitztem Beton und für die Natrium-/Betonwechselwirkung wurden nicht untersucht. Beide gehören aber zu dem zukünftig in ASTEC-Na benötigten Modellumfang.

Beiträge zur Ergänzung von Modellen in ASTEC-Na

Ein weiterer durchgeführter Arbeitspunkt bestand in einem ersten Testen von Natrium-Stoffdaten, die in ASTEC von dem Paket MDB bereitgestellt werden, innerhalb von ASTEC/CPA. Zum Zwecke dieses Testens wurde die ASTEC-Entwicklerversion modifiziert, um die Simulation von Natriumdampf als Komponente der Atmosphäre im Containment zu ermöglichen, zunächst noch ohne die Kondensierbarkeit zu berücksichtigen. In einem Testfall wurden in Anlehnung an den akademischen Rechenfall zum Natriumsieden in Abschnitt 0 ca. 70 kg verdampftes Natrium in einer Stickstoffatmosphäre (ca. 20 % Na / 80 % N_2) ausgehend von 1200 K bei 1,5 bar in einem Containment (mit einem Volumen von 1000 m^3) mit einem Wärmestrom von 100 kW über 1000 s erhitzt und mit einer CONTAIN-Rechnung verglichen. Dieser Vergleich (Abb. 3.21, Abb. 3.22) zeigt den typischen Einfluss unterschiedlicher Stoffdaten für Natrium auf die Thermohydraulik im Containment auf. In MDB gibt es für Natrium zwei verschiedene Stoffdatensätze, für die als Referenz der Code SIMMER sowie das Argonne National Laboratory (ANL) genannt wird. Aus den gezeigten Rechenverläufen geht hervor, dass die ANL-Stoffdaten im Schnitt für die betrachteten Randbedingungen eine größere Wärmekapazität bei konstantem Volumen für das Gasgemisch zugrunde legen, als die

SIMMER-Daten (niedriger Temperaturanstieg). Andererseits wird bei unterschiedlichen Temperaturen in etwa derselbe Druck erzielt, was auf unterschiedliche Werte für die Dichte in Abhängigkeit von Druck und Temperatur zurückgeht. Für den gleichen Testfall mit reiner Stickstoffatmosphäre gibt es keine Unterschiede zwischen ASTEC und CONTAIN.

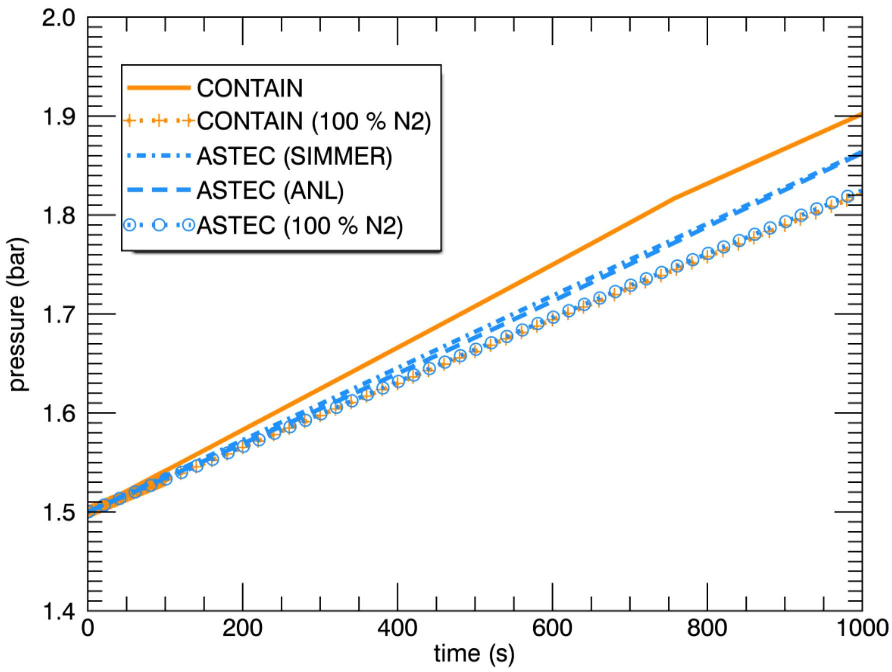


Abb. 3.21 Vergleich zwischen den berechneten Drücken im Behälter bei weiterem Aufheizen eines Na-Dampf/Stickstoffgemisches; beide Stoffdatenmodelle in ASTEC führen zu identischem Druckverlauf; CONTAIN rechnet einen schneller ansteigenden Druck

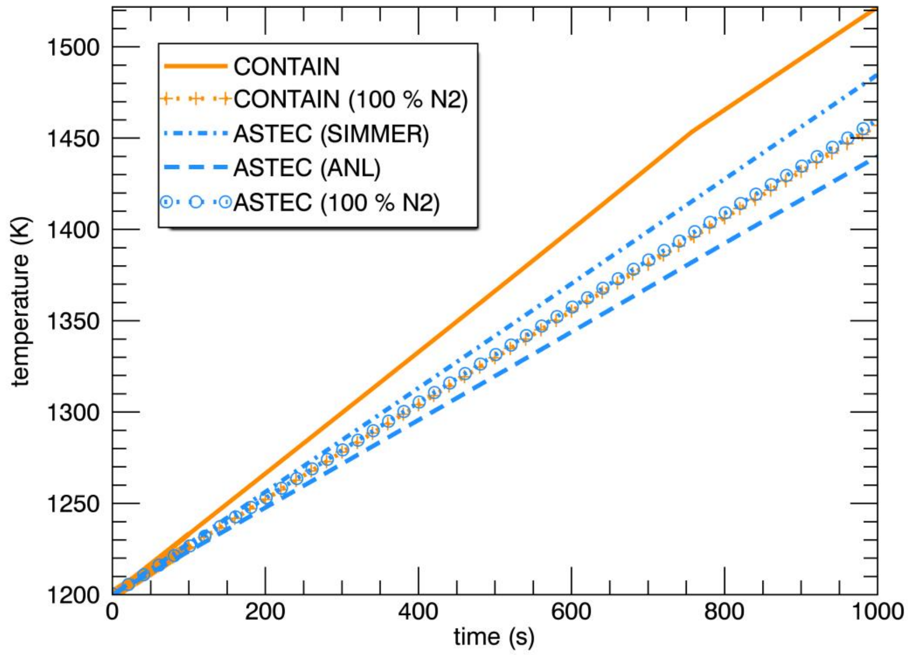


Abb. 3.22 Vergleich zwischen den berechneten Temperaturen in der Behälteratmosphäre bei weiterem Aufheizen eines Na-Dampf/Stickstoffgemisches; die Stoffdatenmodelle in ASTEC sowie in CONTAIN führen zu Temperaturunterschieden von maximal etwa 100 K im betrachteten Zeitraum

Die gewonnenen Erkenntnisse wurden auf den periodischen Fortschrittstreffen des JASMIN-Projektes (Oktober 2012 in Karlsruhe, April 2013 in Lyon, März 2014 in Petten) sowie einem Arbeitstreffen zu WP 2.3 (im August 2014 in Garching) den Partnern vorgestellt und diskutiert.

Aus den Diskussionen leiten sich folgende Ergebnisse ab:

– Das Sieden von Natrium wird relevant, wenn im Containment nach Versagen des Reaktortanks der Brennstoff den Natriumpool von innen beheizt und eine ausreichende Kühlung des Natriumpools nicht gewährleistet ist. Unter Verweis auf die Aktivitäten der GRS zum SNR-300 stellte die GRS die langfristige Notwendigkeit eines solchen Modells heraus. Die EU-Partner messen diesem Phänomen aber zurzeit keine große Priorität bei, was vermutlich den noch fehlenden konkreten Informationen zum Containment-Design zukünftiger SFR-Prototypen geschuldet ist.

– Dem Verhalten von Natriumbrandaerosolen wird von den Partnern zurzeit größere Priorität beigemessen. Dies betrifft sowohl die Entstehung von Aerosolen bei z. B. Lachenbränden als auch daran anschließende physikalisch-chemische Transfor-

mationen von Brandaerosolen im Kontakt mit der Containment-Atmosphäre. Im Fokus der Diskussion stehen drei Themen:

- Basierend auf detaillierten Rechnungen mit einem CFD-Code wird zurzeit bei CIEMAT eine Korrelation entwickelt, bei dem die Aerosolproduktion bei einem Lachenbrand auf den Prozess der **homogenen Keimbildung** im direkt an die Verbrennungszone angrenzenden Gasgemisch zurückgeführt wird. Der Massenstrom und die Größenklassenverteilung der neu gebildeten Aerosolpartikel hängt demnach von der lokalen Übersättigung an gasförmigen Verbrennungsprodukten ab. Zur Berücksichtigung dieses Vorganges schlägt CIEMAT einen Modellansatz für ASTEC-Na/CPA zur Berechnung der Aerosolproduktion in Abhängigkeit von thermohydraulischen Größen vor, die in CPA verfügbar sind. Ein Bericht zu diesem Modell wird von CIEMAT erst nach Fertigstellung dieses Abschlussberichtes der GRS zur Verfügung gestellt werden. Dieses Modell würde prinzipiell ein Natriumbrandmodell wie im Falle des Lachenbrandes ersetzen und stellt darüber hinaus Informationen über die Größenklassenverteilung bei der Keimbildung der Partikel zur Verfügung. Auch wenn die Relevanz dieses Modellansatzes zurzeit von der GRS noch als kritisch angesehen wird, soll eine Implementierung in ASTEC-Na/CPA durch die GRS im Frühjahr 2015 erfolgen, um einen Fortgang der grundlagenorientierten Forschung bei CIEMAT hierzu weiter zu ermöglichen.

- Die Natriumbrandaerosole Na_2O und Na_2O_2 unterliegen in weiterem Kontakt mit der Atmosphäre folgenden **chemischen Transformationen**, von denen angenommen wird, dass sie sukzessiv zu herabgesetzter chemischer Toxizität der resultierenden Aerosole führen /MAT 14/:

$$2\,Na_2O_2 + 2\,H_2O \rightarrow 4\,NaOH + O_2 \tag{3.20}$$

$$2\,NaOH + CO_2 \rightarrow Na_2CO_3 + H_2O \tag{3.21}$$

$$Na_2CO_3 + CO_2 + H_2O \rightarrow 2\,NaHCO_3 \tag{3.22}$$

  Die chemischen Transformationen werden begrenzt durch Diffusionsprozesse der beteiligten Gaskomponenten in den um das Aerosolpartikel entstandenen Stoffschichten. Hierfür wurde von IRSN Mitte 2014 ein Modellansatz vorgestellt /MAT 14/, das den molaren Gasstrom an den Reaktionsflächen durch die jeweiligen Stoffschichten berechnet. Es gibt aber bislang wenig experimentelle Daten, um das Modell zu validieren. Die Hydroxid-Bildung kann in Experimenten mit feuchter Atmosphäre nachgewiesen werden, wie bereits im Falle von ABCOVE AB-7 disku-

tiert. Der Modellansatz von IRSN soll im Winter 2014/2015 in ASTEC-Na/CPA eingebaut werden.

- Ein weiterer Diskussionspunkt sind von CIEMAT vorgeschlagene Modifikationen an dem verfügbaren Modell zur turbulenten Agglomeration von Aerosolpartikeln. Zurzeit werden Details zu diesen Modifikationen von CIEMAT ausgearbeitet und es ist geplant, diese in ASTEC-Na/CPA zu implementieren und nach Benchmarking zu bewerten.
- Die Ergebnisse der Diskussionen zwischen den Partnern sind in den JASMIN-Bericht zum Arbeitspunkt WP2.3 /HER 13b/ eingeflossen, der den Entwicklungsbedarf in ASTEC-Na von quelltermrelevanten Modellen mit Bezug zum Containment von SFR-Anlagen zusammenfasst.
- Die bei der GRS vorliegende Version von CONTAIN V2.0 kann für die Begleitung der Modellentwicklung in ASTEC-Na und zukünftig zu umfangreichen Validierungszwecken in Bezug auf die Natriumthermohydraulik, auf Natriumbrände und auf das Verhalten von Natriumbränden herangezogen werden.

3.4 Aktualisierung der Code-Infrastruktur – Übertragung von Modelländerungen zwischen COCOSYS und ASTEC

3.4.1 MEDICIS-Siedemodell

Das vereinfachte Modell zur Berücksichtigung der Flutung der Schmelze in der Reaktorgrube mit Wasser, das in COCOSYS zusammen mit der Modelloption für den effizienten Wärmeübergang zwischen Schmelze und Beton verwendet werden kann (vgl. Abschnitt 3.2.2 in /SPE 12/), wurde nach ASTEC übertragen und erfolgreich anhand von MACE M3b (vgl. Abb. 3.23) getestet. Der für die Nachrechnung von MACE M3b benutzte effektive Wärmeübergangskoeffizient zwischen Schmelze und Beton (am Boden des Schmelzepools) von $h_{\mathrm{bot}} = 200\ \mathrm{W/(m^2K)}$ ist in ungefährer Übereinstimmung zu Empfehlungen, die im SARNET2-Rahmen von europäischen Experten für oxidische Schmelzen gegeben wurden /CRA 14/. Für den Wärmeübergang nach oben wurde mit $h_{\mathrm{top}} = 300\ \mathrm{W/(m^2K)}$ ein Wert in derselben Größenordnung verwendet. Die von MEDICIS unterschätze Temperatur der Schmelze (Abb. 3.24) deutet daraufhin, dass die Ansätze für die Wärmeübergangskoeffizienten zu hoch waren, da die langfristige Temperatur der Schmelze in der quasi-stationären Phase bei vorgegebener Leistung

hauptsächlich durch die Effizienz der Wärmeübergänge (sowie der Temperaturrandbedingungen) bestimmt wird. Bei weniger effizienten Wärmeübergängen wäre eine größere Temperaturdifferenz ΔT zwischen Schmelze und Oberfläche nötig, um die frei gesetzte Wärme abzuführen. Ein geringerer Wärmeübergangskoeffizient nach oben wäre auch in Übereinstimmung mit der im Experiment MACE M3b beobachteten Separation zwischen Kruste und Schmelze an der Schnittstelle zum Wasser. Auf parametrische Untersuchungen hierzu wurde aber verzichtet, da es um die prinzipielle Überprüfung der erfolgreichen Portierung des Modells von COCOSYS nach ASTEC ging. ASTEC erbringt mit dem Siedemodell in MEDICIS nun vergleichbare Ergebnisse wie COCOSYS.

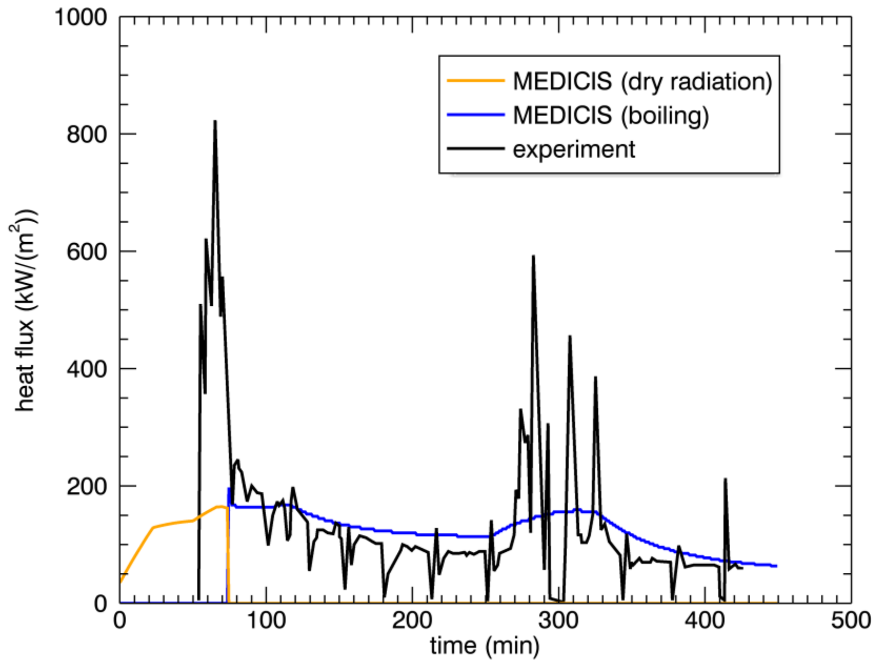


Abb. 3.23 Mit dem vereinfachten Siedemodell in ASTEC berechneter Wärmeübertrag zwischen Schmelze und Wasserpool im Versuch MACE M3b im Vergleich zum Experiment

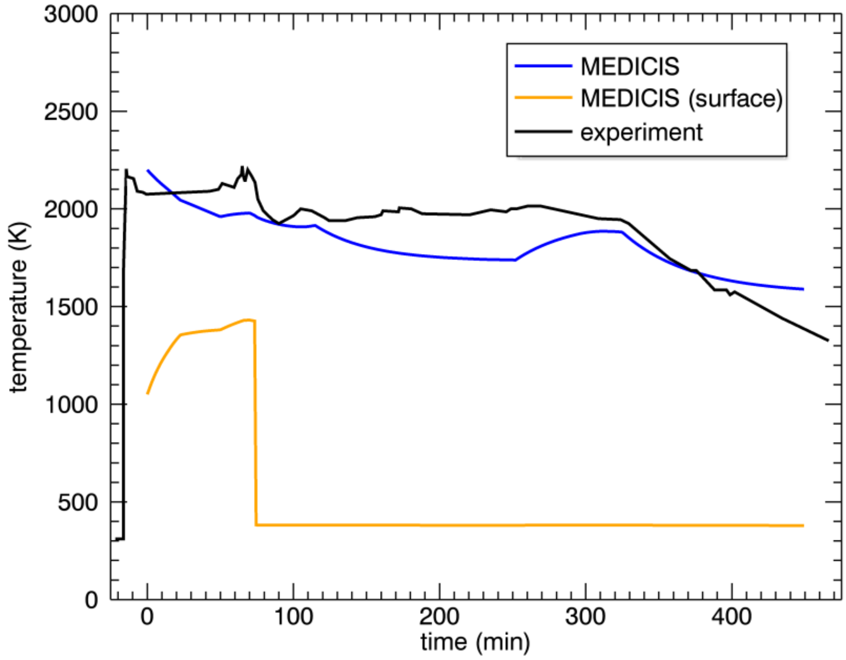


Abb. 3.24 Mit dem vereinfachten Siedemodell in ASTEC berechnete Temperaturen der Schmelze und der Schnittstelle zwischen Schmelze und Wasser im Versuch MACE M3b im Vergleich zum Experiment

3.4.2 Modelle zur Berechnung der H2-Rekombination (PAR)

Im Rahmen des Vorgängerprojektes RS1185 ist die Reaktionskinetik des in COCOSYS vorhandenen Rekombinatormodells zum Abbau von H_2 aus der SB-Atmosphäre unter Unfallbedingungen umgestellt worden. Arbeiten des Forschungszentrums Jülich /DRI 06, BOE 06/ hatten gezeigt, dass die Rekombinationsrate an den katalytischen Platten nicht einer Arrhenius-Reaktionskinetik unterliegt, wie es in dem ursprünglich aus RALOC stammenden Modell unterstellt wurde, sondern dass die Rekombinationsrate durch die Diffusion von Wasserstoff aus der Atmosphäre an die katalytischen Platten begrenzt wird. Eine entsprechende Modelländerung ist in COCOSYS umgesetzt worden /NOW 10/, die auch für die OECD-THAI-HR-Versuche gute Ergebnisse liefert. Diese Modellverbesserung war aber noch nicht in ASTEC/CPA eingebaut worden. Bei der Analyse der in ASTEC vorhandenen Modellbasis ist aufgefallen, dass auch die korrelative Beschreibung mittels der AREVA-Korrelation (oder SIEMENS) in ASTEC/CPA noch nicht dem letzten Stand entsprach, der von Hill beschrieben wird /HIL 03/. Daher sind auch die Rekombinator-Korrelationen in ASTEC auf den Stand von COCOSYS gebracht worden.

Die Modellübertragung erfolgte in zwei Schritten. Zunächst sind die Modelländerungen in den ASTEC-V2.0-Zweig eingepflegt worden, aus dem die immer noch aktuelle Entwicklungsreihe der Anwenderversion mit der derzeitigen Bezeichnung V2.0rev3patch1 gebildet wird. Ein Benutzerhandbuch über die jetzt vorhandenen Modelle ist erstellt worden und wird mit der aktuellen ASTEC-Version ausgeliefert /NOW 13, NOW 14 für V2.1/. Der Arbeitsaufwand für die Übertragung in den CVS-Trunk, aus dem die gegen Ende 2014 veröffentlichte ASTEC-Version V2.1 erstellt werden wird, erwies sich als wesentlich aufwändiger. Die Einteilung der CVS-Entwicklerzweige in eine aktuelle Anwenderversion (derzeit V2.0revX) und eine Entwicklerversion (derzeit V2.1) hat zur Folge, dass die Entwicklerversion in einem sehr viel schlechteren Zustand bezüglich Stabilität und Aussagekraft der vorhandenen Datensätze ist. So mussten zunächst an anderer Stelle eingeführte Modelländerungen auch in dem Rekombinatormodell beachtet werden. Unter anderem war eine Berücksichtigung des geänderten Enthalpie-Nullpunkts aufgrund der vereinheitlichten Benutzung von Stoffwerten aus der MDB im gesamten ASTEC-Paket nötig. Die Korrelation als auch das Detailmodell sind erfolgreich nach ASTEC/CPA transferiert worden. Da in der Entwicklerversion (V2.1-Zweig) massive Änderungen an der Codestruktur durchgeführt werden, sind die einzelnen Unterprogramme in beiden Zweigen oft signifikant unterschiedlich. Aufgrund dieser Erfahrungen zeichnet sich ab, dass für den parallelen Entwicklungsaufwand von ASTEC/CPA und COCOSYS zukünftig ein erhöhter Personalaufwand nötig ist.

Durch die zusätzliche Modellübertragung der AREVA-Korrelation entstand ein größerer Arbeitsaufwand als geplant. Um die korrekte Implementierung in beiden Codes zu überprüfen, ist ein Testdatensatz für COCOSYS und ASTEC entwickelt worden, der dasselbe Problem mit beiden Codes berechnet. Dabei handelt es sich um eine reine Testrechnung, der kein unterstelltes Anlagenszenario zugrunde liegt. Ein Vergleich der berechneten gesamten Rekombinationsrate bestehend aus Wasserstoff (H_2) und Kohlenstoffmonoxid (CO) mit beiden Codes ist in Abb. 3.25 aufgetragen. Die blauen Kurven zeigen die Ergebnisse mit ASTEC-V2.0 und die grünen Kurven die Ergebnisse der aktuellen COCOSYS-Entwicklerversion. Unterschiedliche Symbole kennzeichnen die AREVA- (bzw. SIEMENS-)Korrelation, die aktuelle GRS-Korrelation („GRSDIFF“) und das detaillierte Rekombinatormodell („det GRSDIFF“). Alle ASTEC/CPA Ergebnisse sind in guter Übereinstimmung mit den COCOSYS Ergebnissen, was zeigt, dass die Implementierungen der Korrelationen und des Detailmodells in beiden Codes gleich sind. In diesem Rechenfall startet die CO-Einspeisung bei 12 670 s. Bis dahin berechnet das detaillierte GRS_DIFF Modell etwa 20 % höhere Rekombinationsraten als die Korrelation. Diese Abweichung ist innerhalb der üblichen Bandbreite zwischen Korrela-

tion und dem Detailmodell. Danach nimmt der Unterschied bis auf 30 % zu. Ein Vergleich zwischen COCOSYS und ASTEC-V2.1 liefert ähnliche Ergebnisse.

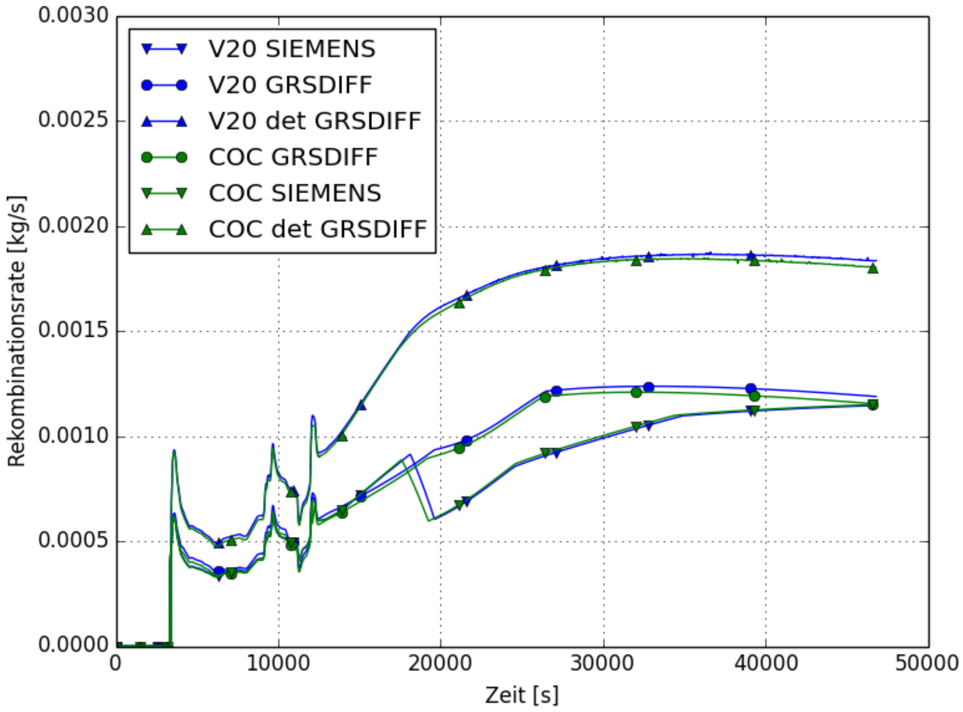


Abb. 3.25 Rekombinationsraten verschiedener Rekombinatormodelle in COCOSYS und ASTEC/CPA

4 Querschnittsaufgaben

In diesem Arbeitspunkt wurden die folgenden Einzelzielsetzungen verfolgt:

- **AP3.1 Spaltproduktrückhaltung in Wasservorlagen – Pool Scrubbing**
  Zum Phänomen der Spaltproduktrückhaltung in Wasservorlagen (Pool Scrubbing) wurden die Modelle in COCOSYS und ASTEC eingehend untersucht, um den aktuellen Stand von F&E zu diesem Phänomen neu zu bewerten. Zielsetzung war es, die Aussagen zum Einfluss des Pool Scrubbing aus einer Anlagenrechnung in RS1190 durch Abgleich mit einer Auswertung vorhandener experimenteller Daten abzusichern und zukünftigen Forschungsbedarf aufzuzeigen.

- **AP3.2 Rückwirkung aus der Validierung und Anwendung von COCOSYS und ASTEC**
  Aus der bei der Ruhr-Universität Bochum durchgeführten externen Validierung des Moduls MEDICIS zur Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI), das sowohl Bestandteil von ASTEC als auch von COCOSYS ist, sowie aus den bei AREVA Erlangen und KIT Karlsruhe laufenden Experimenten zu MCCI und den noch laufenden Untersuchungen in SARNET2 zu diesem Thema wurden Rückwirkungen für das Modell MEDICIS zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung ausgewertet und umgesetzt. In diesem Arbeitspunkt wurden solche Rückwirkungen zeitnah bearbeitet, wodurch die enge zeitliche Verzahnung von Entwicklung und Validierung der Rechenprogramme zur hohen Qualität der Modelle und der Anwenderexpertise beiträgt.

- **AP3.3 Internationale Kooperation**
  Die Kooperation der GRS mit internationalen Forschungseinrichtungen wurde fortgesetzt. Im Projekt betrifft dies die aktive Mitwirkung (Program Review Group – PRG) an den Vorhaben OECD-STEM und OECD-BIP2. Darüber hinaus wurde die Beteiligung am Forschungsnetzwerk SARNET2 fortgesetzt und mit Ende des Vorhabens im März 2013 beendet. Hier war neben der Modellertüchtigung von ASTEC für SWR, die Anwendung von ASTEC auf Unfallszenarien bei DWR sowie die Unterstützung externer Anwender Bestandteil der Arbeiten. Prioritäten bei der Weiterentwicklung von ASTEC wurden in Absprache zwischen den Entwicklerteams von IRSN und GRS festgelegt.
  Im Rahmen des während der Vorhabenslaufzeit gestarteten neuen EU-Vorhabens CESAM zur Weiterentwicklung und Anwendung von ASTEC beteiligte sich die

GRS intensiv bei der Fortschreibung des internationalen Standes von F&E zu den Themen gefilterte Druckentlastung, Pool Scrubbing, Wirkung von NIS-Rekombinatoren und MCCI, jeweils mit Blick auf Modellansätze, die für ASTEC geeignet sind. In CESAM ist eine größere Anzahl von ASTEC-Anwendern vereinigt, die bereits in SARNET2 zusammengearbeitet haben.

- **AP3.4 Qualitätssicherung**
  Dieses Arbeitspaket hatte die Qualitätssicherung der durchgeführten Arbeiten zu COCOSYS und ASTEC als Zielsetzung. Schwerpunkte bei der Qualitätssicherung waren das Konfigurationsmanagement und das Änderungsmanagement für die Softwareentwicklung. Auch Aufgaben im Rahmen der Benutzerunterstützung (User Support) und zur Bearbeitung von Problemen und Rückflüssen von Anwendern für COCOSYS und ASTEC waren zu bearbeiten. Im Zeitfenster der Projektlaufzeit wurden Arbeiten an der neuen Programmversion V2.4 abgeschlossen und die Version herausgegeben.

4.1 Spaltproduktrückhaltung in Wasservorlagen – Pool Scrubbing

Im abgeschlossenen Vorhaben RS1190 zur Validierung von COCOSYS wurden neue Rechnungen bzgl. Pool Scrubbing zu den POSEIDON- und EPRI-III-Versuchen sowie den neuen Versuchen der RWTH Aachen mit COCOSYS und ASTEC/CPA durchgeführt. Außerdem sind dort gekoppelte ATHLET/CD-COCOSYS Rechnungen zu den Unfällen in Fukushima am Beispiel eines SWR der Baulinie 69 durchgeführt worden. Die aktuelle Validierung des SPARC-Modells ist im Abschlussbericht des Validierungsvorhabens (/KLE 12/, Abschnitt 3.1, S. 217) dargestellt worden. Nachrechnungen der Schweizer POSEIDON-Versuche und der amerikanischen EPRI-III-Versuchsreihe zeigen durchgehend zu niedrige Rückhaltefaktoren für Aerosole im Vergleich zu den verschiedenen Experimenten. Dieses Verhalten wurde bereits von Fischer /FIS 98/ Ende der 90er Jahre festgestellt. Weiter ist untersucht worden, auf welchem Stand die heutigen SPARC-Versionen in ASTEC/CPA und COCOSYS sind. Für COCOSYS werden Ergebnisse wie in Rechnungen mit SPARC-B98/mod, die von Schmitz /SCH 03/ durchgeführt worden sind, erreicht. Mit ASTEC werden noch wesentlich geringere Rückhaltungen berechnet. Die erzielten Ergebnisse werden derzeit auch im Rahmen des CESAM-Projektes im internationalen Rahmen eingebracht und diskutiert, wie in Abschnitt 4.3.3.1 dargestellt wird.

Innerhalb dieses Entwicklungsvorhabens erfolgte eine Begleitung der Fukushima-Rechnungen im abgelaufenen Vorhaben RS1190 am Beispiel eines SWR der Baulinie 69. Durch die Analyse von aufgetretenen Programmabstürzen konnten einige Programmierfehler in SPARC behoben worden, was insgesamt eine fehlerfreie Berechnung der Spaltproduktrückhaltung in den Fukushima-Rechnungen ermöglichte. Gründe für aufgetretene Fehler waren auch darin zu suchen, dass mit SPARC für Fukushima die Rückhaltung von Aerosolen in der Kondensationskammer berechnet werden musste, die mit Dampf und nicht-kondensierbaren Gasen bei hohen Temperaturen über die Sicherheitsventile am RDB eingebracht wurden. Frühere Analysen berechneten die Rückhaltung von Aerosolen, die durch Gasmassenströme aus der Druckkammer (bei deutlich niedrigeren Temperaturen) in die Kondensationskammer eingebracht wurden. Die Fehlerkorrekturen haben die Stabilität des SPARC-Modells in COCOSYS auch im Hinblick auf gekoppelte Rechnungen mit ATHLET/CD erhöht. Eine quantitative Auswertung der Ergebnisse oder ein Vergleich mit Daten aus den Anlagen konnte nicht durchgeführt werden, da einerseits die Anlagendaten nicht zugänglich waren und andererseits der angewendete Datensatz die Anlage nicht direkt simuliert. Solche Arbeiten sind im Rahmen eines weiteren OECD-Vorhabens geplant, an dem sich die GRS in Zukunft mit ATHLET-CD/COCOSYS-Analysen beteiligt.

Darüber hinaus erfolgte eine vertiefte Einarbeitung in die komplexe Modellbasis von SPARC. Ein besonderer Fokus lag dabei auf der Impulsabscheidung beim Einströmen der Partikel in den Pool. Im Fokus stand dabei das Modell des Epstein-Jets mit der SPARC-Routine „epjet“. Die Analyse zeigte, dass in SPARC viele Einzelphänomene mit einem hohen Detailgrad analytisch beschrieben werden, für die einzeln keine Validierung durchgeführt werden kann, da keine diesbezüglichen Experimente vorliegen. Diese Problematik erstreckt sich durch das gesamte SPARC-Paket. Weiter ist versucht worden, die Codebasis teilweise zu modernisieren und öfter auftauchende Codefragmente in Unterroutinen auszulagern.

Parallel zu der Codeanalyse zeigten die Arbeiten im Validierungsvorhaben, dass die vorhandene Modellbasis von SPARC keine genauen Nachrechnungen zulässt. Der Grund liegt aber nicht nur in der undurchsichtigen Modellierung mittels SPARC, sondern auch an den oft unklaren Aerosoldaten in experimentellen Arbeiten. Theoretische Analysen mit SPARC zeigen eine sehr starke Abhängigkeit der Rückhaltung von der Partikelgrößenverteilung des einströmenden Aerosols. Die bekannten Experimente zeigen aber starke Unsicherheiten bezüglich der Messungen der Partikelgrößenverteilung vor und hinter der Wasservorlage und geben auch keine Angaben über die Re-

produzierbarkeit der Versuche. In den Experimenten ist in der Regel nur eine charakteristische Partikelgrößenverteilung gemessen worden, die als konstant über die Versuchsdauer angenommen wurde. Für die Modellbildung erscheint aber eine gleichzeitige Messung der Partikelgrößenverteilung vor und hinter dem Pool erforderlich. Die heute verfügbare Messtechnik lässt nach Aussage der Experimentatoren der RWTH Aachen eine Bestimmung der Partikelgrößenverteilung mit einer Integrationszeit von 2 Minuten zu. Aufgrund der verbesserten Messtechnik erscheint daher die Durchführung von neuen Experimenten als sinnvoll. Solange aber neue experimentelle Daten nicht verfügbar sind, müssen konkrete Überlegungen zu möglichen korrelativen Ansätzen für Dekontaminationsfaktoren als Alternative zum SPARC-Modell zurückgestellt werden.

Derzeit werden Pool-Scrubbing-Experimente an der RWTH Aachen im nationalen Projekt SAAB (Severe Accident Aerosol Behavior) durchgeführt, deren Ergebnisse von der GRS in 2015 erwartet werden. Weitere Experimente werden im Rahmen des EU-FP7-Projektes PASSAM durchgeführt, an dem die GRS nicht beteiligt ist. Allerdings wurde zwischen den Konsortien der EU-Projekte CESAM und PASSAM ein Austausch von bestimmten Projektergebnissen vereinbart, in die die GRS über die CESAM-Teilnahme Einblick erhält. Außerdem findet derzeit auf Initiative von Becker Technologies eine Diskussion statt, eine Kooperation zwischen koreanischen, amerikanischen und deutschen Experten auf dem Gebiet Pool-Scrubbing aufzubauen. Dazu fand am 14. Mai 2014 ein Sondierungstreffen der beteiligten Institutionen bei Becker Technologies statt. An dem Treffen waren Becker Technologies, RWTH Aachen, Ruhr-Universität Bochum, GRS Abteilung Forschungsbetreuung, GRS Abteilung Barrierenwirksamkeit (alle Deutschland), POSTECH University, KAERI (beide Südkorea) und University of Missouri-Columbia (USA) beteiligt. Die Abteilung Barrierenwirksamkeit stellte dabei die Erfahrungen in der Modellentwicklung für Pool-Scrubbing und der Anwendung des SPARC-Modells vor. Die auf dem Treffen bei Becker Technologies anwesenden Partner bekundeten ein großes Interesse, eine Kooperation mit Schwerpunkt auf experimentellen Arbeiten zum Pool-Scrubbing zu gründen. Dabei sollen speziell Programme für Doktoranden durchgeführt werden. Einigkeit bestand weiter darin, dass zusätzlich zu SPARC eine korrelative Beschreibung des Pool-Scrubbing sinnvoll erscheint, weshalb neue vorhandene Experimentaldaten auch zur Entwicklung einfacher Korrelationen genutzt werden sollten, die die Haupteinflussfaktoren des Pool-Scrubbing-Phänomens berücksichtigen. Derzeit wird von Becker Technologies ein Entwurf für eine mögliche Kooperation erarbeitet. Auf nationaler Ebene stellte die RWTH Aachen die Herausgabe von Messergebnissen zum Pool-Scrubbing an die GRS für die nahe Zukunft in Aussicht.

Das Treffen bei Becker Technologies zeigte, dass erste Modellierungsarbeiten für Pool-Scrubbing zunächst anhand der Experimente der RWTH Aachen im Nachfolgevorhaben zu RS1508 durchgeführt werden können. Längerfristig ist eine erweiterte experimentelle Datenbasis in Aussicht, falls die internationale Kooperation zustande kommt. Der Zugriff auf experimentelle Daten ist in jedem Fall abzuwarten, bevor neue Modellierungsansätze verfolgt werden. Sowohl die Experimente der RWTH Aachen als auch die Gründung der internationalen Pool-Scrubbing-Kooperation oder möglicherweise Daten aus PASSAM lassen den Zugriff auf neue Experimentaldaten erwarten.

4.2 Rückwirkung aus der Validierung und Anwendung

Die Anwendung von COCOSYS und ASTEC auf Versuchsanlagen und verschiedenste Typen von Kernkraftwerken durch GRS und IRSN als auch durch externe Anwender warf Fragen zur Modellierung auf und führte zur Identifikation von Programmfehlern. Einige ausgewählte Beispiele für dadurch erforderliche Programmverbesserungen sind in den folgenden Kapiteln dargestellt.

4.2.1 Verbesserung von MEDICIS

Während der Laufzeit des Projektes ist MEDICIS in COCOSYS in der GRS verstärkt genutzt worden für

- die Validierung anhand der Karlsruher MOCKA-Experimente in RS1514,
- den Einsatz im BMUB-Vorhaben 3613R01320 zur Analyse der Belastung von Gleitdruckventuriwäschern in SHB-Ventingsystemen von DWR-KONVOI und SWR-72 bei Unfällen.

Im Rahmen dieser Arbeiten sind Probleme/Defizite von MEDICIS im Rahmen der Einbindung in COCOSYS identifiziert worden, die in enger Kooperation mit den entsprechenden Anwendern behoben wurden:

- Die Methode der inneren Beheizung der Schmelze bei den MOCKA-Experimenten durch Zufuhr von reaktivem Material erforderte eine genaue Betrachtung thermochemischer Stoffdaten für die Bildung der Reaktionsprodukte sowie die spezifische Wärme dieser. Hier stellte sich heraus, dass eine Aktualisierung/Korrektur einiger Stoffdaten (z. B. für Al2O3) nötig war. Im Zuge dieser Arbeit wurden die Stoffdaten

in der MDB auf der Basis der aktuellen ASTEC-Entwicklerversion aktualisiert. Es zeigte sich ferner, dass die Simulation sehr sensitiv in Bezug auf den Transport chemischer Spezies zwischen den Schmelzeschichten ist: Eine Verlangsamung des Transportes von Metallen, die nach einem Zeitschritt nicht in der Schicht der Oxidschmelze oxidiert waren, in die Metallschnitte führt langfristig zu größerer Leistungsfreisetzung in der Oxidschicht mit Rückwirkung auf die 2D-Verteilung der Wärmeströme. Dies konnte durch entsprechende Codemodifikationen demonstriert werden. Seitens der Validierung erwächst hieraus die komplexe Aufgabe, eine realistische Wahl von Modellparametern und -annahmen zusammenzustellen und mit experimentellen Ergebnissen zu überprüfen. Die Validierungsergebnisse werden für RS1514 dokumentiert.

- In den MOCKA-Experimenten gibt es im oberen Bereich der in den Experimenten genutzten Tiegel eine Auskleidung aus inertem Material (ZrO2). Dies musste in der Simulation entsprechend berücksichtigt werden. Von Entwicklerseite her wurde überprüft, dass die bislang in MEDICIS nicht dokumentierte Option, für dieses inerte Material einen Betonblock mit einer virtuell über den Rahmen realistischer Schmelzetemperaturen hinausgehenden Betonzerstörungstemperatur zu definieren, zum gewünschten Ergebnis führt: Wenn die Schmelzetemperatur kleiner als die definierte Zerstörungstemperatur ist, wird an diesen Beton keine Wärme abgeführt und kein Beton erschmolzen, was eine akzeptable Annäherung an die Realität darstellt.

- Eine Fehlerquelle war die Übergabe von Randbedingungen an der Schnittstelle zwischen MEDICIS und COCOSYS für die konsistente Berechnung der Wärmeübergänge in beiden Modulen. Hier müssen die Randbedingungen (Temperatur, Wärmeübergangskoeffizienten etc.) so übergeben werden, dass mit den beiden Modulen (Thermohydraulikmodul THY in COCOSYS und MEDICIS) ein identischer Wärmeübergang an der Schnittstelle gerechnet wird. Ein Fehler in der Übertragung von Randbedingungen der Strukturoberflächen zwischen COCOSYS und MEDICIS hatte dazu geführt, dass sich die Oberfläche der Schmelze im Falle von MCCI in COCOSYS nicht veränderte, wohingegen MEDICIS bei 2D-Erosion im Bereich der Kavernenseitenwand eine Vergrößerung der Schmelzeoberfläche berücksichtigt. Dies führte zu Inkonsistenzen bei den Wärmeströmen an dieser Fläche und der Fehler wurde korrigiert. Bei einer Flutung der Schmelze mit Wasser wurden Fehler bei der Einspeisung des Wärmestroms unter Siedebedingungen in die Wasservorlage korrigiert (Einspeisung in den falschen Zonenteil, Artefakte durch Wärme-

übergang in COCOSYS bei bestehender Temperaturdifferenz zwischen Wasservorlage und Oberfläche der Schmelze im Falle fehlender Deaktivierung dieser für den Wärmeübergang in COCOSYS). Ferner gab es Inkonsistenzen bei der Berechnung des Wärmestroms unter trockenen Bedingungen in MEDICIS und in THY. Die Fehler wurden korrigiert.

4.2.2 Kopplung zwischen Thermohydraulik und MEDICIS

Im Verlauf des Vorhabens wurden sowohl mit ASTEC als auch mit COCOSYS komplexe Anlagenrechnungen inklusive der Rückwirkungen zwischen Thermohydraulik und Beton-Schmelze-Wechselwirkung (MEDICIS Modell) durchgeführt.

Neben zahlreichen Verbesserungen der Kodierung zur Vermeidung von Fehlern (korrekte Initialisierung von Variablen, Korrekturen aufgrund von Compilerwarnungen), zur Verbesserung von Ein- und Ausgabe des Moduls MEDICIS sowie zur Verbesserung der Restart-Fähigkeit wurde die Programmierung für die Verdampfung aus einer aufgeheizten Wasservorlage verbessert.

Von IRSN wurde festgestellt, dass in der Kopplung CPA - MEDICIS beim Einbringen großer Wärmemengen in einen kleinen Wasserpool unphysikalische Temperaturen für die Wasserphase berechnet werden und es damit zu extrem langen Rechenzeiten bis hin zu Programmabbrüchen kam. Ein gleiches Verhalten zeigte sich kurz darauf auch in COCOSYS bei der Anwendung auf KKW mit WWER-440/270, wenn nach dem Versagen des Reaktordruckbehälters das Kerninventar in die mit nur wenig Wasser gefüllte Reaktorgrube fällt.

In einem ersten Schritt erfolgten einige Programmänderungen bezüglich der Verdampfung von einem siedenden Pool – siehe Kap. 4.4.1.2.

Trotz dadurch erreichter Verbesserungen für eine Reihe von Anwendungen konnte damit das Problem in der Kopplung mit MEDICIS nicht vollständig gelöst werden. Anhand eines einfachen Testbeispiels wurde deshalb das Problem sowohl in ASTEC/CPA als auch COCOSYS intensiver analysiert.

Abb. 4.1 verdeutlicht, dass beim Einbringen einer starken Wärmequelle in das Wasser der Zone "BOX" dieses verdampft (Graph 3) und daraufhin die Wassermasse abnimmt (Graph 2). Nähert sich die Wassermasse dem Wert Null, steigt die Wassertemperatur auf unphysikalische Werte von bis zu 2 400 °C (d. h. weit über die kritische Temperatur

von 374 °C hinaus, Graph 5). Nach vollständiger Verdampfung sehen die berechneten Parameterverläufe wieder vernünftig aus – die Wärme geht direkt in die Atmosphäre und ruft dort (da keine Verdampfungsenergie mehr aufzubringen ist) einen Temperaturanstieg (Graph 5) und damit starken Anstieg des Sättigungsdrucks (Graph 1) hervor, wobei die Sättigung fällt (Graph 4).

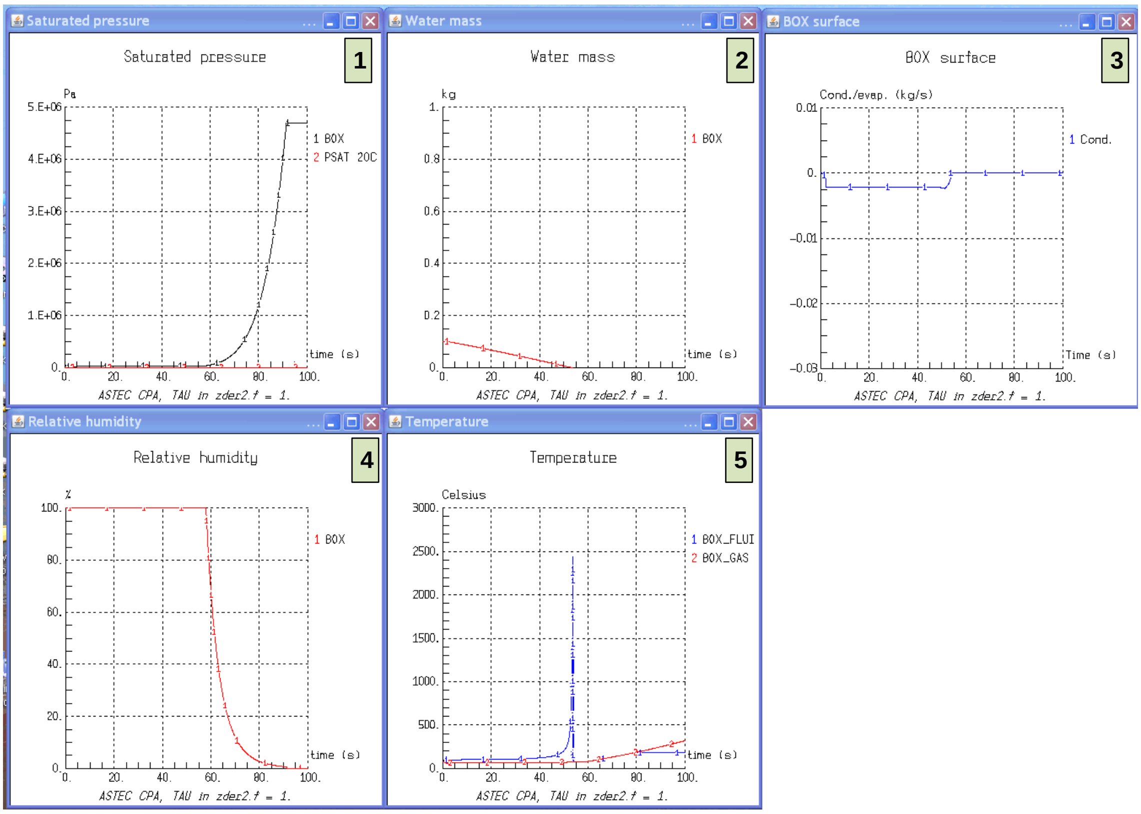


Abb. 4.1 ASTEC V2.0, CPA-Testrechnung mit starker Wärmequelle im Sumpf der Zone "BOX"

Die Analyse ergab, dass der berechnete Verdampfungsmassenstrom GBOIL zu gering ist, d. h. es wird mehr Energie in das Wasser eingebracht als durch die Verdampfung an der Oberfläche entweicht. Von IRSN wurde vorgeschlagen, die in der Berechnung der Verdampfung verwendete Zeitkonstante TAU = 1 s auf 0,001 s zu verringern und damit das Wasser schneller zu verdampfen und somit die Wassertemperatur auf Sättigung zu halten. Im Modell wurde mit TAU = 1 s bisher angenommen, dass die überschüssige Energie innerhalb von 1 s als Dampf entweicht. Der Wert von 1 s war dabei ein Kompromiss zwischen sinnvollen Ergebnissen und Stabilität des berechneten Verdampfungsmassenstromes.

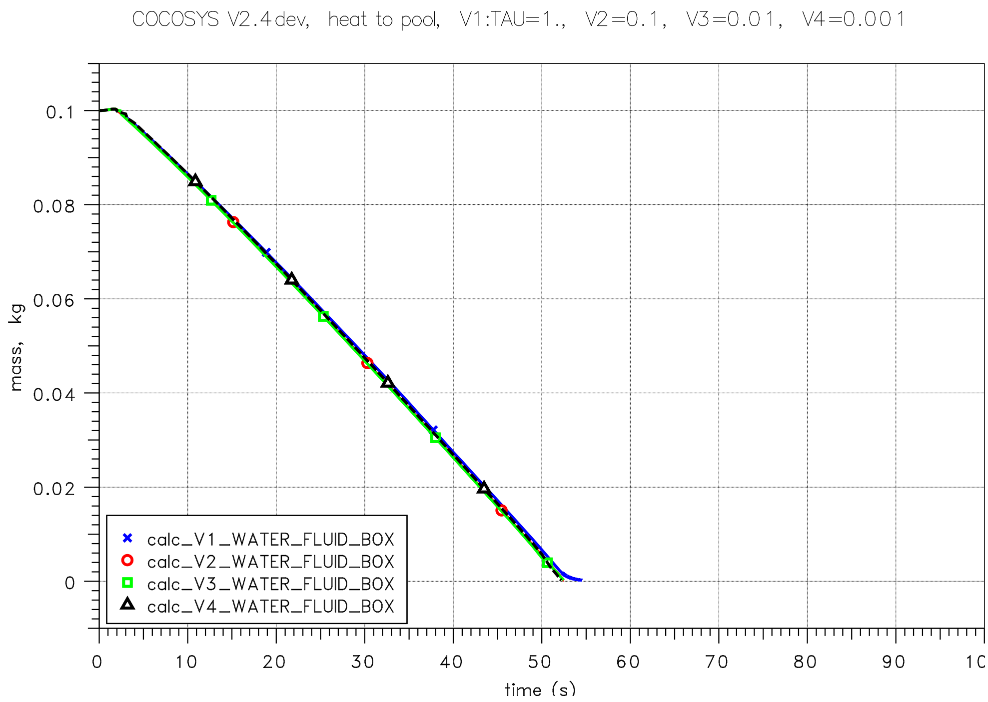


Abb. 4.2 COCOSYS V2.4, Parameterrechnung für die Wassermasse im Sumpf der Zone BOX mit starker innerer Wärmequelle und verschiedenen TAU zwischen 1 und 0,001 s

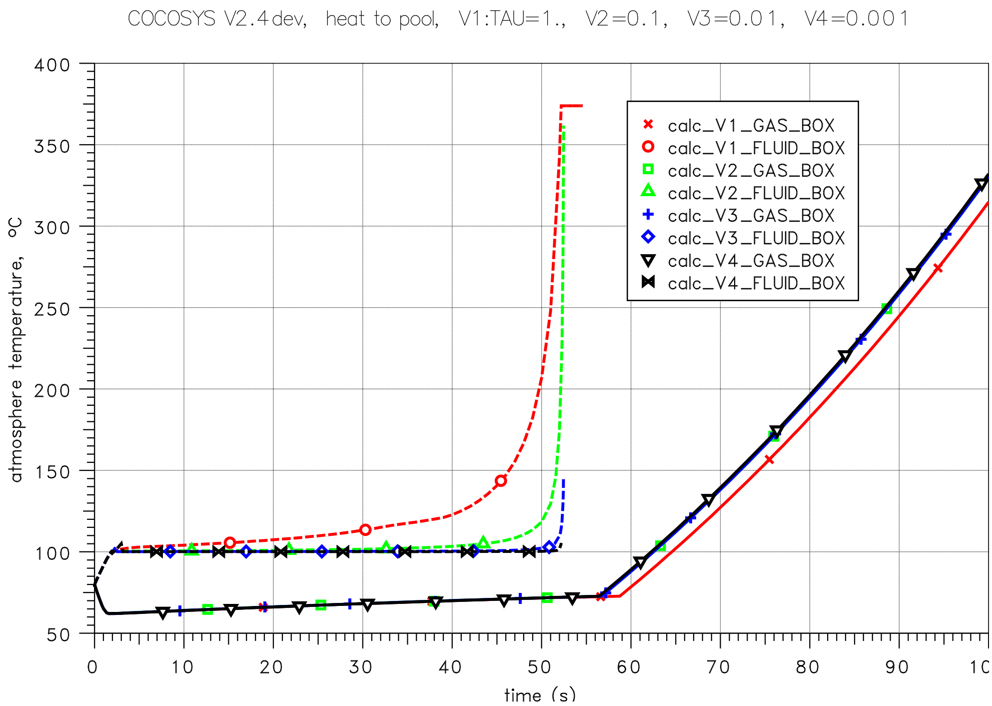


Abb. 4.3 COCOSYS V2.4, Parameterrechnung für die Temperatur in Sumpf und Atmosphäre der Zone BOX mit starker innerer Wärmequelle im Sumpf und verschiedenen TAU zwischen 1 und 0,001 s

Nach Konvertierung des Testdatensatzes zu COCOSYS wurde die von IRSN vorgeschlagene Verringerung von TAU auf 0,001 s auf Stabilität geprüft. Die Verringerung von TAU behebt das Problem mit der Wassertemperatur (Abb. 4.2, Abb. 4.3), ohne dass andere Parameter in relevanter Weise beeinflusst werden.

Eine generelle Verringerung von TAU auf 0,001 s löst zwar das Problem der hohen Wassertemperaturen, hat aber in **COCOSYS-Rechnungen** zu WWER-440/270 in der Anfangsphase des Störfalles weiterhin Instabilitäten bei der Verdampfung und damit lange Rechenzeiten zur Folge.

Zur möglichen Eingrenzung von TAU auf realistische Werte wurden verschiedene Experimente untersucht und nachgerechnet. Dabei stellte sich heraus, dass keine Experimente mit der erforderlichen extremen Wasseraufwärmung vorliegen und eine Validierung deshalb gegenwärtig nicht möglich ist. An der THAI-Anlage wurde 2013 im Rahmen des THAI-V-Programmes die WH-Versuchsserie zur unvollständigen Kondensation durchgeführt, die eventuell verwertbare Aussagen liefert. Dies kann aber erst nach der bisher nicht erfolgten Veröffentlichung der Versuchsdaten eingeschätzt werden.

Da in ASTEC/CPA ein kleines TAU keine nachteiligen Wirkungen auf die benötigte Rechenzeit hat, wird dort jetzt TAU = 0.001 s verwendet.

Um einerseits Standardrechnungen nicht zu beeinflussen (inklusive aller bisherigen Validierungsrechnungen), andererseits aber auch Rechnungen mit der neuen Kopplung zu MEDICIS lauffähig zu machen, wurde für COCOSYS folgender Lösungsansatz getroffen:

$(T_{Wasser} - T_{Sättigung}) < 1$ K	TAU = 1,0
1 K $< (T_{Wasser} - T_{Sättigung}) < 3$ K	Verringerung von 1,0 auf 0,0012 nach der Boltzmann Funktion entsprechend Abb. 4.4: $\text{TAU} = \frac{A1-A2}{1+e^{\left(\frac{(Tw-Ts)-xo}{dx}\right)}} + A2$
$(T_{Wasser} - T_{Sättigung}) > 3$ K	TAU = 0,0012

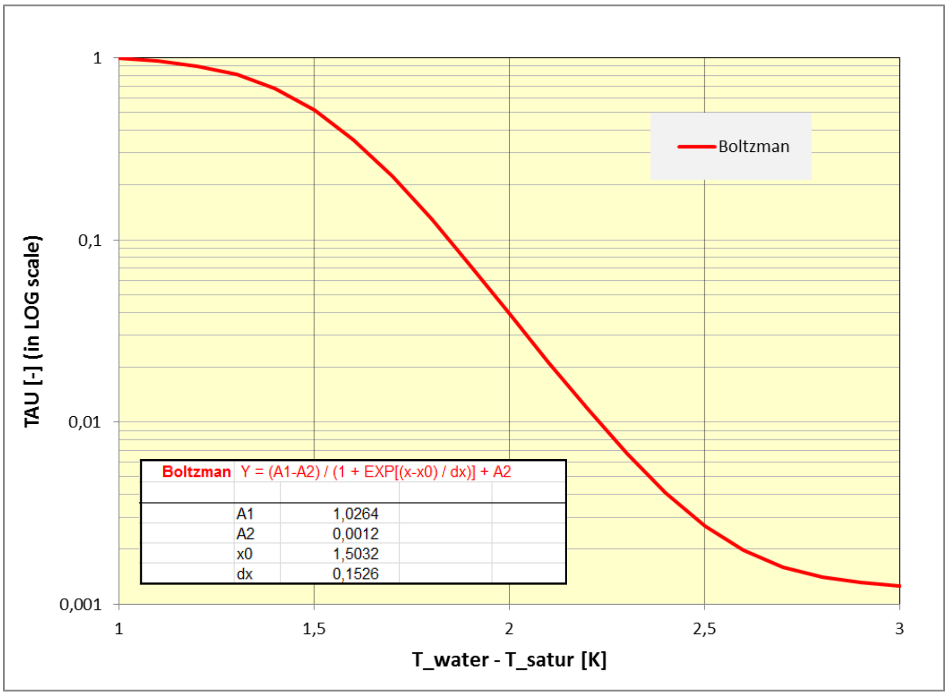


Abb. 4.4 COCOSYS, TAU als Funktion von ($T_{Wasser} - T_{Sättigung}$) im Bereich 1 bis 3 K Wasserüberhitzung

Mit diesem variablen TAU wird praktisch nur eine geringe Wasserüberhitzung zugelassen. Die Ergebnisse sind physikalisch plausibel und die Rechenzeit liegt in üblichen Größenordnungen, sodass mit dieser Änderung jetzt auch Analysen zu Unfallszenarien mit Kernschmelze unter Anwendung der COCOSYS-Hauptmodule THY und CCI möglich sind.

Weitere Verbesserungen der Kopplung von den genannten Modulen betreffen die Zeitsynchronisation. In der Integrationsschleife des Thermohydraulik-Hauptmoduls (THY) wird zwischen den Schritten „vor der Integration“ zur Durchführung von Schalthandlungen, „Integration“ zur Durchführung der eigentlichen Integration und „nach der Integration“ zur Durchführung von nachträglichen Berechnungen (z. B. Energiebilanz), letztere ohne Rückwirkungen auf andere Modelle, unterschieden. Für das Modell FRONT zur Simulation der Wasserstoffverbrennung werden nun auch nach der Integration im letzten Schritt Schalthandlungen durchgeführt. Im Fall einer Kopplung mit einem anderen Modul (hier CCI) und internen Zeitschritten des THY-Moduls wurden diese notwendigen Schalthandlungen nicht durchgeführt. Dieses wurde nun korrigiert, so dass der dritte Schritt auch bei internen Zeitschritten nach dem Integrationsschritt ausgeführt wird. Der zusätzliche Rechenbedarf wird dabei in Kauf genommen.

4.3 Internationale Kooperation

4.3.1 Beteiligung an SARNET2

4.3.1.1 Arbeiten zu ASTEC im Überblick

Innerhalb der Laufzeit des Entwicklungsvorhabens wurde auch das EU-Exzellenznetzwerk SARNET2 (Severe Accident Research NETwork) nach 4 Jahren Laufzeit (2009-2013) abgeschlossen. Im Rahmen der Teilnahme an SARNET2 war die GRS an folgenden SARNET-Arbeitspaketen beteiligt:

- WP1: Management (MANAG)
- WP3: Information Systems (IS)
- WP4: ASTEC (ASTEC)
- WP4.1: Users' Support and Integration (USI)
- WP4.2: ASTEC Code ASsesment (ACAS)
- WP4.3: ASTEC Model EXtension (AMEX)
- WP5: Corium and Debris Coolability (COOL)
- WP6: Molten Corium Concrete Interaction (MCCI)
- WP7: Containment (CONT)
- WP8: Source Term (ST)

Im vorliegenden Entwicklungsvorhaben waren allein die Arbeiten zu WP4 relevant, da sie insbesondere mit AP 4.1 eng an die Code-Entwicklung anschließen. Die Beteiligung an den übrigen Arbeitspaketen erfolgte im Validierungsvorhaben RS1514 für COCOSYS und ASTEC.

Die Beiträge der GRS zu SARNET2 im Überblick:

- Teilnahme an User-Workshops zu ASTEC (2013 in Aix-En-Provence)
  Von Seiten der GRS wurden Präsentationen zur Anlagenrechnung mit ASTEC und einem Vergleich mit ATHLET-CD/COCOSYS, zum Stand der Modellentwicklung zu

Direct Containment Heating (vgl. Abschnitt auf S. 107) sowie zu MCCI (Nachrechnung von MOCKA-Versuchen mit MEDICIS) gehalten.

- Beiträge zu Konferenzen (ERMSAR, Oktober 2013, Avignon /CHA 13b/) sowie zu Veröffentlichungen in Zeitschriften (Annals of Nuclear Energy /CHA 14/, Nuclear Engineering and Design /CHA 14b/).
- Beiträge zur Erstellung aktualisierter Dokumente im Rahmen der Freigabe neuer ASTEC-Versionen, z. B. /CHA 13c, CHA 13d/.
- Beiträge zur Abschlussdokumentation der Arbeiten zu SARNET WP4 (ASTEC), insbesondere Anwendungsrechnungen zu KONVOI /CHA 13, CHA 13e/.
- Im Rahmen der Anwenderunterstützung wurden externe Code-Anwender bei der Lösung von Problemen unterstützt. Außerdem beteiligt sich die GRS bei der Durchführung von Einführungsveranstaltungen zu ASTEC (z. B. Februar 2014, Aix-en-Provence /REI 13b/) und erstellt die Trainingsfolien und Übungsaufgaben.

In WP4.2 ACAS beteiligte sich die GRS an der Validierung und Qualifizierung von ASTEC speziell durch die Anwendung auf DWR-Anlagen deutscher Bauart (KONVOI). Des Weiteren wurde ein Beitrag zur Validierung des ASTEC-Moduls CPA in Form einer Nachrechnung zu einem Sprühexperiment in der französischen MISTRA-Anlage erbracht. Die Arbeitsergebnisse sind im SARNET-Rahmen in verschiedenen Progress- und Assessment-Reports dokumentiert worden. Bereits im Vorläufervorhaben war auch die Untersuchung der Anwendbarkeit von ASTEC auf SWR abgeschlossen worden. Dazu war die frühe Phase eines Störfalls bis zum Beginn der Kernaufheizung mit den ASTEC-Modulen CESAR für den Kühlkreislauf und CPA für den Sicherheitsbehälter am Beispiel eines SWR der Baulinie 69 gerechnet worden und mit verfügbaren ATHLET-CD-Ergebnissen verglichen /SPE 12/.

Da der Hauptteil der Arbeiten schon im Vorläufervorhaben erbracht worden war, konzentrierte sich die Beteiligung auf Abschlussarbeiten und insbesondere auf Beiträge zu diversen Fortschritts- und Abschlussberichten (s. o.). Im Sinne eines Resümees bzw. einer Zusammenfassung wird nachfolgend beispielhaft ein Ergebnis der Analysen zu DWR vom Typ KONVOI dargestellt. Neben den bis dato verwendeten Vergleichsdaten aus entsprechenden MELCOR-Rechnungen wurden erstmalig auch verfügbare ATHLET-CD/COCOSYS-Ergebnisse herangezogen. Da die ATHLET-CD/COCOSYS-Rechnungen zu diesem Zeitpunkt noch nicht abgeschlossen waren, sind die Schlussfolgerungen als vorläufig zu betrachten.

4.3.1.2 ASTEC-Analysen für DWR

Zielsetzung

Zielsetzung der Arbeiten waren neben einem Vergleich der Ergebnisse von Unfallanalysen für DWR verschiedene im Vorhaben freigegebene ASTEC-Versionen untereinander (also V2.0 mit V1.3), jeweils ein Vergleich mit MELCOR- und ATHLET-CD/COCOSYS Rechnungen. Die Auswahl der Unfallszenarien orientierte sich an den schon verfügbaren Rechnungen sowohl der Vorläuferversion ASTEC-V1 als auch der MELCOR-Version 1.8.6. Generell waren die Szenarien nach deren Eintrittshäufigkeit und der Risikorelevanz basierend auf Ergebnissen der PSA der Stufe 1 ausgesucht und schon in RS1180 untersucht worden.

Als Unfallszenario wurde u. a. ein 50 cm²-Leck im kalten Strang des mit dem Druckhalter verbundenen Loops untersucht (Ergebnisse nachfolgend dargestellt). Bei dem ausgewählten Szenario mussten Annahmen über die Systemverfügbarkeiten dem Analyseziel angepasst werden. So werden z. B. schadensverhindernde Maßnahmen, die Wärmeabfuhr über die Sekundärseite und aktive Einspeisesysteme (Notkühlsysteme) teilweise als unwirksam oder ausgefallen angenommen, um den Bereich von Unfallabläufen zu erreichen. Im vorliegenden Leckstörfall wird ein vollständiger Ausfall der Hochdruck- und Niederdrucksicherheitseinspeisung unterstellt, so dass hier nur die Druckspeicher als passives Einspeisesystem zur Verfügung stehen. Die bei kleinen Lecks notwendige Sekundärseite für die Abfuhr der Nachwärme wurde zunächst durch die Annahme der Verfügbarkeit der Notspeisesysteme sichergestellt. Deren unterstellter Ausfall nach einer gewissen Zeit leitet aber schließlich den Übergang in die Kernzerstörungsphase ein.

Für die dann durchgeführten Unfallrechnungen sind die ASTEC-Module CESAR, ICARE, CPA, SOPHAEROS, RUPUICUV, CORIUM, MEDICIS, IODE sowie ISODOP aktiviert worden. Damit lassen sich prinzipiell alle während des Unfallszenarios auftretenden Phänomene, die im Kühlkreislauf und speziell im Kern auftreten (⇨ In-Vessel) sowie solche, die im Containment auch nach RDB-Versagen auftreten (⇨Ex-Vessel), beschreiben.

Ergebnisse der Analyse zum 50 cm²-Leck im kalten Strang

Nachfolgend werden charakteristische Rechnungsdaten aller 3 Programmsysteme gegenübergestellt. Die ASTEC-Ergebnisse werden dabei durch AST-xxx, die MELCOR-Ergebnisse mit MEL-xxx und diejenigen von ATHLET-CD/COCOSYS mit ATH-xxx bezeichnet. Es wurde die Zeitspanne zwischen dem Öffnen des Lecks zum Zeitpunkt t = 0 s und dem Versagenszeitpunkt des Reaktordruckbehälters simuliert bzw. bei ATHLET-CD bis zum erstmaligen Verlagern von Schmelze ins untere Plenum.

Mit Initiierung des Störfalls durch Lecköffnung fallen Druck und Temperatur im Primärkreislauf schnell ab. Bei Kühlmitteldruck (KMD) < 131 bar (zusätzlich zur Druckdifferenz Δp Anlagen- oder Betriebsräume gegen Atmosphäre > 30 mbar) erhalten die FD-Abblaseabsperrventile ein AUF-Signal und das schnelle sekundärseitige Abfahren mit 100 K/h wird ausgelöst, so dass beide Druckverläufe nahezu parallel abfallen. Dies wird von allen Codes in guter Übereinstimmung wiedergegeben (Abb. 4.5).

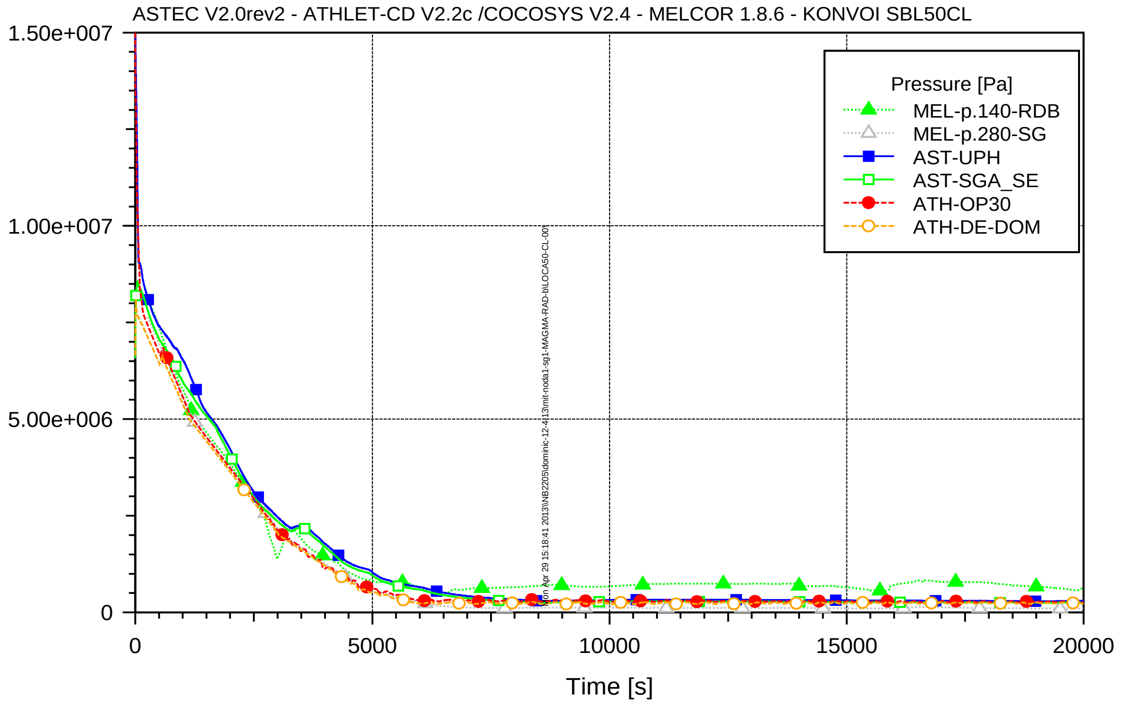


Abb. 4.5 Druckverlauf im Primär- und Sekundärkreislauf für ASTEC, MELCOR und ATHLET-CD/COCOSYS

Nach Reaktorschnellabschaltung wird nur noch die Nachwärmeleistung erzeugt. Diese Nachwärmeleistung wurde für die Codes vorab abgeglichen.

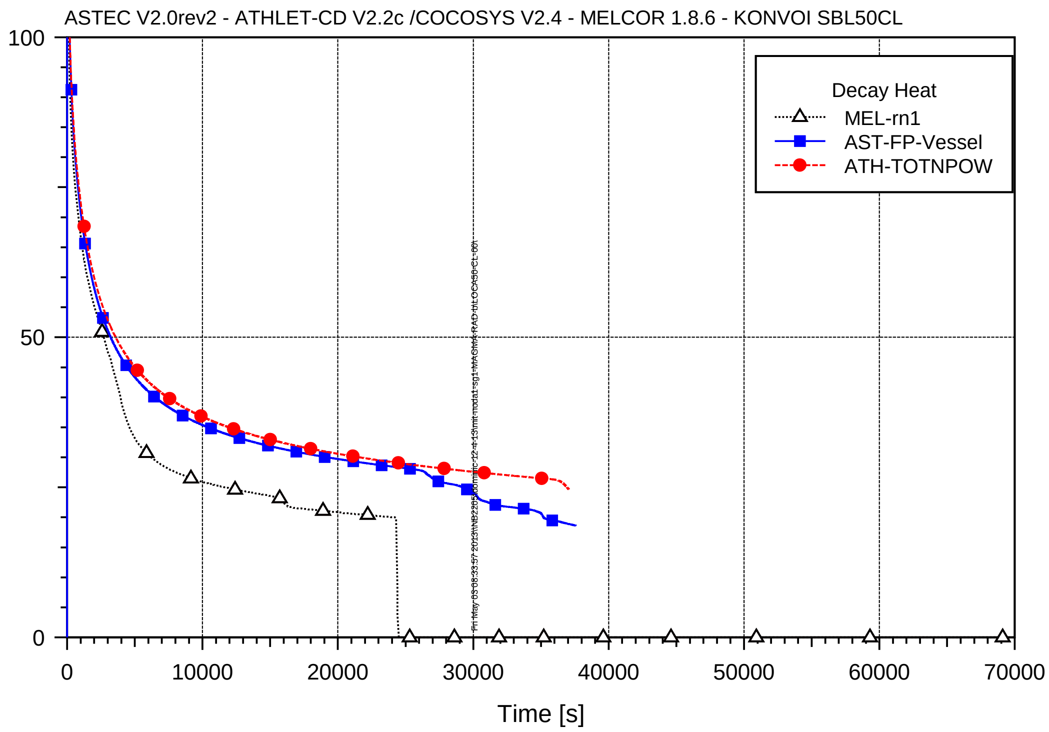


Abb. 4.6 Nachzerfallsleistung im Kern für ASTEC, MELCOR und ATHLET-CD/COCOSYS

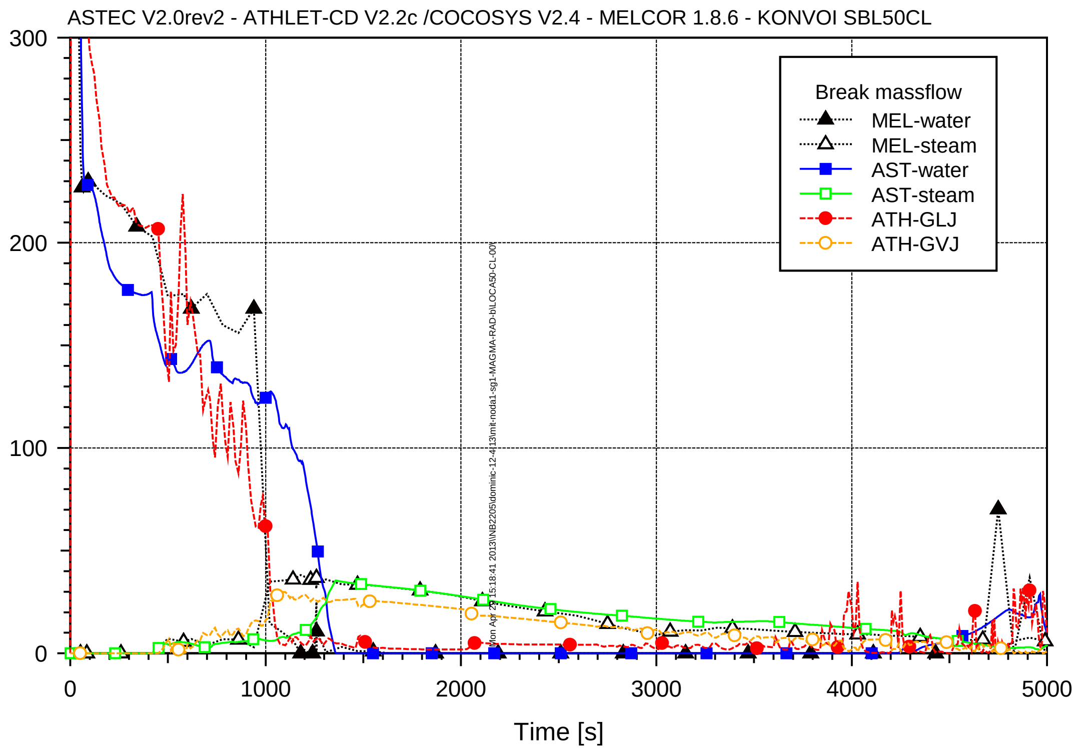


Abb. 4.7 Leckmassenstrom (Wasser, Dampf) mit ASTEC, MELCOR und ATHLET-CD/COCOSYS

In Abb. 4.6 wird davon nur die im Kern freigesetzte Leistung gezeigt. Diese reduziert sich mit Beginn der Kernzerstörung um die dann freigesetzten Spaltprodukte bzw. der damit zusammenhängenden Leistung. Deutlich ist bei MELCOR eine recht frühzeitige Abnahme zu erkennen, gleichbedeutend mit einer frühen Spaltproduktfreisetzung. Bei ASTEC zeigt sich ein deutlicher Abfall nach ca. 25 000 s, bei ATHLET-CD nach mehr als 35 000 s kurz vor Rechnungsende.

Bei ATHLET-CD konnte die Rechnung noch nicht bis zum RDB-Versagen gerechnet werden, da die entsprechenden Modellerweiterungen noch nicht verfügbar waren. Die Rechnung wurde hier bis zum erstmaligen Verlagern von Schmelzemasse ins untere Plenum gerechnet, wobei das Kriterium bei der hier verwendeten Version ein vom Anwender vorzugebender Zeitpunkt ist. Dieser wurde so gewählt, dass die verlagerte Masse in etwa derjenigen Masse entspricht, die auch bei ASTEC in der Phase der ersten Verlagerung errechnet wurde. Zwischenzeitlich wurde die Modellierung bei ATHLET-CD verbessert, so dass jetzt bei Vorhabensende eine Version zur Verfügung steht, die bis zum RDB-Versagen rechnen kann. Für die hier durchgeführte Arbeit im Rahmen von SARNET stand diese Version aber noch nicht zur Verfügung.

Mit Lecköffnung stellt sich zunächst ein großer Massenstrom aus reinem Wasser ein, der sich innerhalb der ersten 1 000 s entsprechend dem abfallenden Druck reduziert, bis sich schließlich Sättigungsbedingungen einstellen und zunächst ein Zweiphasengemisch und ab ca. 1 200 – 1 500 s mehr oder weniger reiner Dampf abströmt (vgl. Abb. 4.7, S. 158). Dies wird mit guter Übereinstimmung von allen Codes wiedergegeben. Einfluss auf das Abströmverhalten haben hier geometriebedingte Parameter wie Lage des Lecks und auch die Fähigkeit der Modelle, Zweiphasenströmungen realistisch abzubilden. Hier besteht bei ASTEC, wo im Allgemeinen ein homogen vermischtes Volumen angenommen wird, die Möglichkeit, einen virtuellen Wasserspiegel zu errechnen. Abhängig davon wird dann das abströmende Medium (Wasser, Dampf oder zweiphasig) bestimmt. Hier bieten ATHLET-CD und MELCOR mit den sogenannten 6-Gleichungsansätzen (Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie und Impuls für zwei Phasen) bessere Möglichkeiten als ASTEC/CESAR (Masse und Energie für zwei Phasen sowie eine Mischimpulsgleichung). Trotzdem sind die Übereinstimmungen generell gut.

Eine deutlich bessere Aussagekraft liefern aber integrale Werte, wie in Abb. 4.8 für Wasser und Dampf und Abb. 4.9 für die aus dem Kühlkreislauf ins Containment abgeführte Energie gezeigt. Bei ähnlichen Tendenzen zeigen sich insbesondere beim

Dampf deutliche Unterschiede, die z. B. bei der Masse teilweise einen Faktor 2 ausmachen. ATHLET-CD errechnet den geringsten Energieaustrag, bei gleichzeitig langsamstem Kernzerstörungsablauf. Hier muss zukünftig noch genauer geklärt werden, ob diese Werte maßgeblich den Unfallablauf beeinflussen. Unter Umständen spielt die Sekundärseite eine größere Rolle bei ATHLET-CD. Die längere Kühlbarkeit bei ATHLET-CD kann z. B. auch darauf zurückzuführen sein, dass sich eine Reflux-Condenser-Phase einstellt, die dadurch charakterisiert ist, dass aus dem Kern ausdampfendes Wasser in den Dampferzeugerrohren wieder kondensiert, dann im Gegenstrom zum Dampf wieder in den Kern zurückfließt und den Kern bei nahezu konstantem Füllstand über einen langen Zeitraum effizient kühlt. Dann kann trotz geringerem Austrag von Energie über das Leck aber entsprechend größerem Austrag über die Dampferzeuger der Kern länger gekühlt werden (die Wärmeabgabe über das Leck ist in erster Näherung in gleicher Größenordnung wie die Abgabe über die Dampferzeuger). Erst gegen Ende zeigt sich bei ATHLET-CD ein deutlicher Anstieg im Dampfaustrag, der auf die dann einsetzende Kernaufheizung und Kernzerstörung schließen lässt.

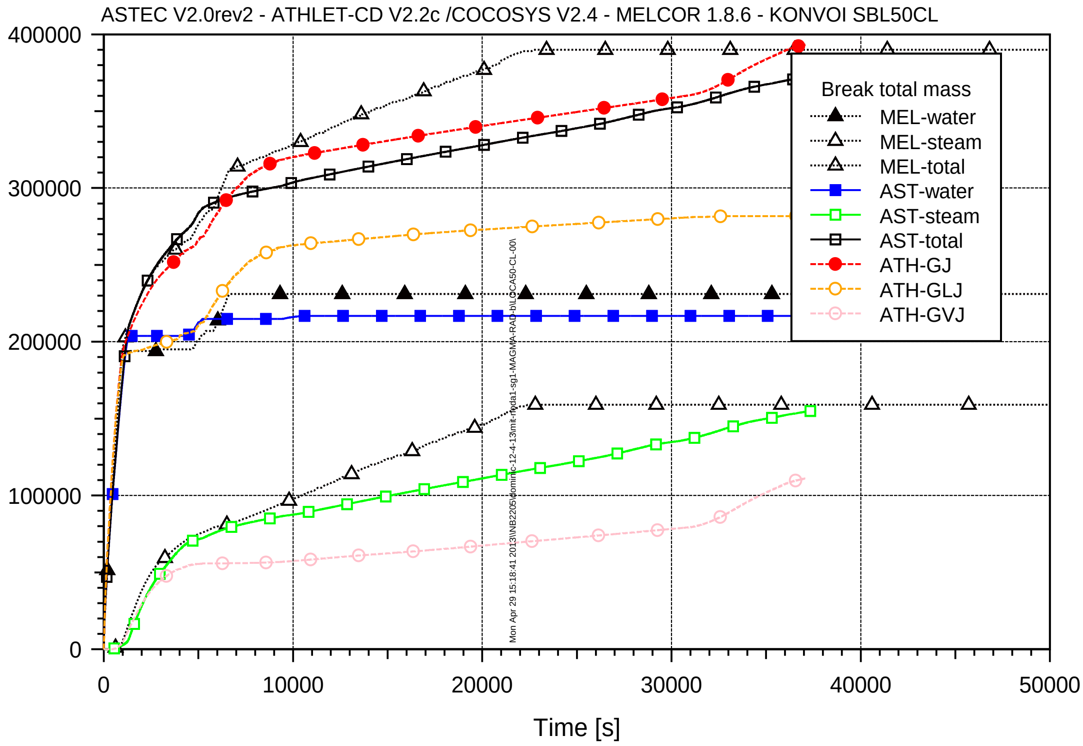


Abb. 4.8 Integral über das Leck ausgetragene Masse (Wasser, Dampf, Total) mit ASTEC, MELCOR und ATHLET-CD/COCOSYS

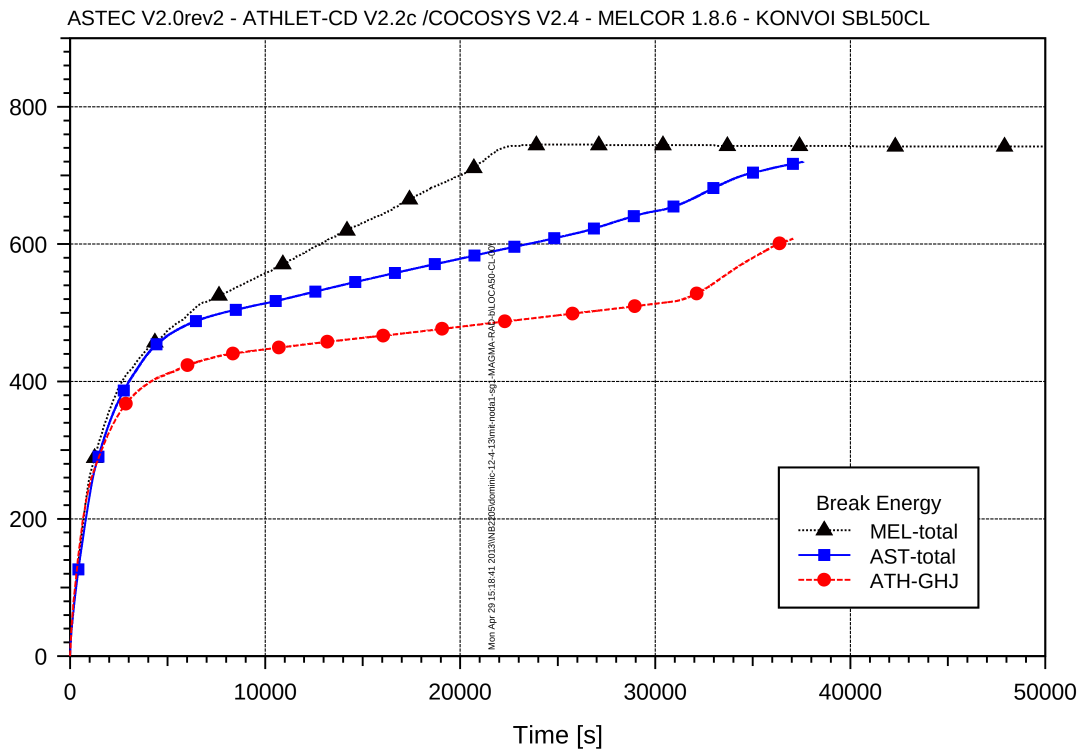


Abb. 4.9 Integraler Energieaustrag aus dem Leck mit ASTEC, MELCOR und ATHLET-CD/COCOSYS

In Abb. 4.10 ist der Füllstand im RDB (MELCOR und ATHLET-CD) bzw. in der Kernregion (bei ASTEC) dargestellt. Deutlich zeigt sich hier der frühzeitige Abfall des Füllstandes bei MELCOR, der für die frühzeitige Kernaufheizung verantwortlich ist. Mit Beginn der Druckspeicher-(DS)-Einspeisung (Abb. 4.11) kann der Kern aber zunächst geflutet werden. Nach Beendigung der DS-Einspeisung nach 5 000 – 6 000 s setzt dann die Kernfreilegung instantan wieder ein und führt zu einem forcierten Ausdampfen und frühen RDB-Versagen nach 24 360 s bei MELCOR. Die schon angesprochene langfristige Kühlmöglichkeit des Kerns bei ATHLET-CD zeigt sich auch am Füllstand im Kern, der über einen Zeitraum von fast 30 000 s einen gefluteten Kernbereich anzeigt. ASTEC prognostiziert hier tendenziell ein ähnliches Verhalten wie ATHLET-CD, kann aber die Reflux-Condenser-Phase, vermutlich aufgrund der einfacheren Modellierung gegenüber dem 6-Gleichungssystem, nicht in diesem Umfang wiedergeben, so dass das Ausdampfen wesentlich früher beginnt. Auch wenn die ASTEC- und ATHLET-CD-Rechnungen zu nahezu gleichen Zeitpunkten enden, muss berücksichtigt werden, dass die ASTEC-Rechnung mit RDB-Versagen bei t = 37 589 s gestoppt worden ist, während die ATHLET-Rechnung bei erstmaligem Verlagern von Schmelze ins untere Plenum beendet wird und also der RDB noch intakt ist. Die MELCOR-Rechnung konn-

te über den Zeitpunkt des RDB-Versagens hinaus fortgeführt werden, so dass hier auch danach noch Werte geliefert werden.

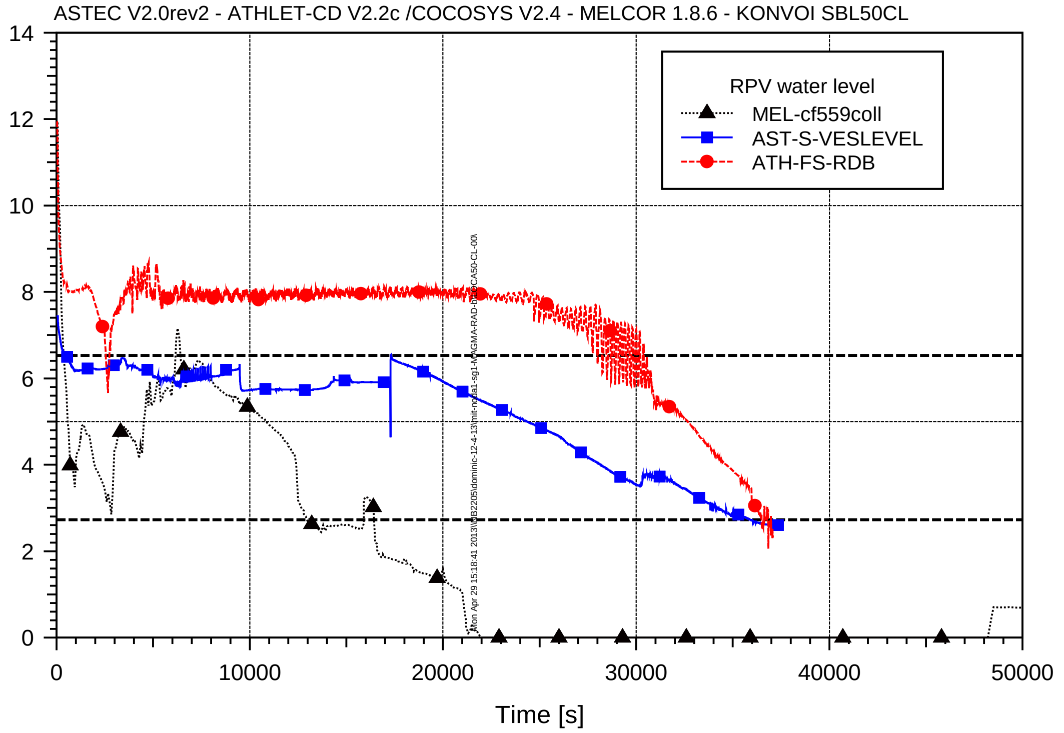


Abb. 4.10 Füllstand im Kern mit ASTEC, MELCOR und ATHLET-CD/COCOSYS

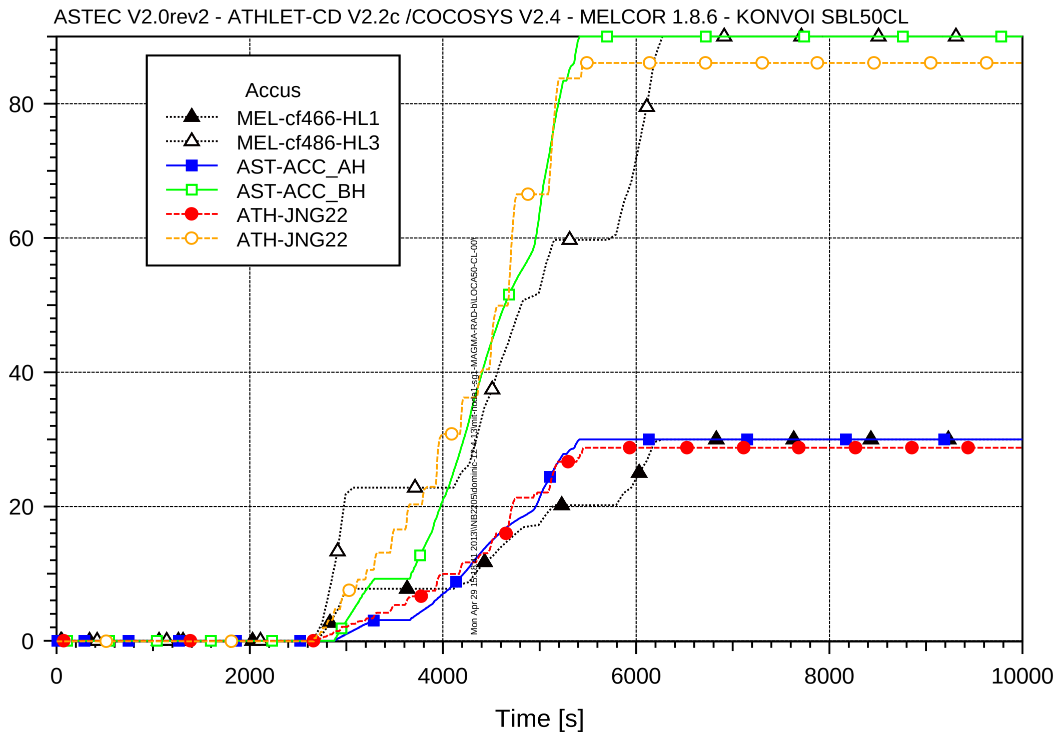


Abb. 4.11 Integrale Wassereinspeisung aus den Druckspeichern (heißseitig für Kühlschleife 10 und 30, die kaltseitigen werden 500 s nach Anstehen der Notkühlkriterien abgesperrt)

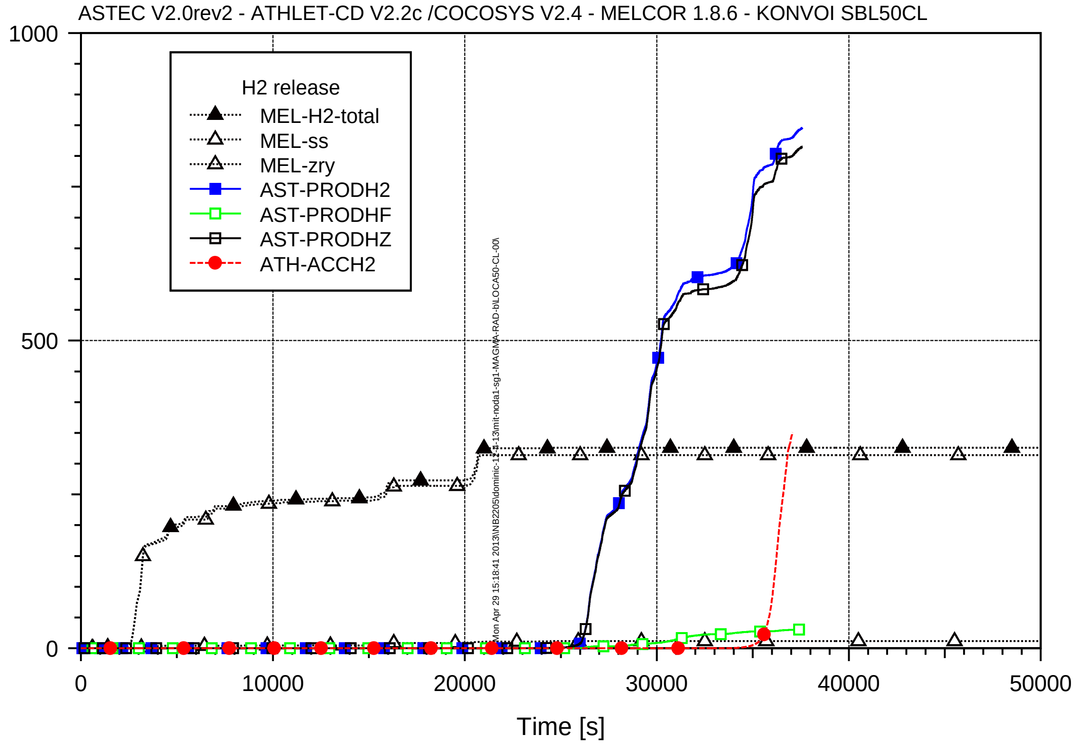


Abb. 4.12 Integrale Freisetzung von Wasserstoff aus dem Kern für ASTEC, MELCOR und ATHLET-CD/COCOSYS

Abschließend ist in Abb. 4.12 die integral freigesetzte Menge an Wasserstoff dargestellt. Wie bereits erwähnt, führt bei MELCOR die deutlich stärker ausgeprägte Freilegung des Kerns schon innerhalb der ersten Stunde nach Unfalleintritt zu einer entsprechend starken Wasserstofffreisetzung schon in dieser frühen Phase. Es werden ca. 60 % der Gesamtmasse freigesetzt. Dieses Verhalten wird so von ATHLET-CD und ASTEC nicht prognostiziert. Zwar zeigt auch ATHLET-CD einen kurzen Einbruch des Füllstandes (s. o.), generell bleibt der Kern aber bis ca. 30 000 s geflutet. Bei ASTEC liegt der Füllstand in den ersten ca. 17 000 s knapp unter der Kernoberkante und fällt erst mit Beginn der Kernaufheizung recht linear ab. Dies legt die Vermutung nahe, dass es evtl. einen kritischen Füllstand zu geben scheint, bei dessen Unterschreitung die Kernaufheizung so stark angefacht wird (durch die exotherme Zr-Oxidation und schlechtere Wärmeabgabe an die Dampfphase im Vergleich zu Wasser), dass eine ausgedehnte Kernzerstörung zwangsläufig die Folge ist. Diese kann, und das zeigen die MELCOR-Rechnungen auch, in der Phase der DS-Einspeisung wieder stark eingeschränkt werden. Mit Beendigung der DS-Einspeisung setzt sich dann aber die Kernfreilegung unmittelbar fort, so dass ein RDB-Versagenszeitpunkt errechnet wird (t = 24 360 s), der deutlich früher als bei ASTEC (t = 37 589 s) eintritt. Bei ATHLET-CD wird ungefähr zu diesem Zeitpunkt das erstmalige Verlagern von Schmelze ins untere

Plenum angezeigt. Da der Zeitpunkt der Verlagerung direkt durch einen Anwenderparameter definiert wird, muss angemerkt werden, dass andere Verlagerungskriterien sicherlich auch deutlich andere, insbesondere auch frühere Zeitpunkte zulassen könnten.

Weitere Einflussfaktoren auf die Kernzerstörung sind z. B. die Oxidation sowie das Aufschmelzen der Stahlstrukturen des RDB. So werden z. B. die RDB-Wand und die Kernumfassung nicht bei allen Codes als oxidier- und abschmelzbare Strukturen definiert.

Von großem Einfluss ist zudem die Modellierung der Kernzerstörung selbst. Im Gegensatz zur derzeit realisierten Modellierung bei ATHLET-CD wird bei ASTEC in Abhängigkeit von verschiedenen, teils auch vom Anwender zu definierenden Kriterien, die Modellierung der Kernregion von CESAR an ICARE übergeben. Dies hat nicht nur zur Folge, dass dann thermohydraulische Randbedingungen an den Schnittstellen der Module – einerseits am Ringraum des RDB-Eintritts und andererseits am Kernaustritt ins obere Plenum – spezifiziert und erfüllt werden müssen, sondern auch, dass die thermohydraulische Modellbasis zumindest teilweise unterschiedlich ist. Dies betrifft insbesondere die Behandlung der Wasser- und Dampfphase in der Kernregion, bei der im Falle von ICARE eine Wasserphase mit Blasenanteil im unteren Bereich und eine darüber liegende reine Dampfphase unterstellt wird. Die Verdampfung von Wasser, das von oben in den heißen Kernbereich einströmt, wird zwar bilanziert, der verbleibende Teil wird dann aber in die darunterliegende Zelle des Fluidkanals „weitergereicht“. Es findet dabei jedoch keine hydraulische Wechselwirkung des aufsteigenden Dampfes mit dem abwärts strömenden Wasser statt. Somit können Phänomene durch die gegenläufige Strömung von Wasser und Dampf (z. B. Wassermitriss) nicht berücksichtigt werden. Dies kann insbesondere in der Phase der Einspeisung aus den Druckspeichern, der Notkühleinspeisungen, aber auch während der Reflux-Condenser-Phase durchaus Auswirkungen auf die Kühlbarkeit der Kernregion haben.

Unterschiede ergeben sich auch aus der Modellierung der Kernzerstörungsphänomene. Diese wurde in früheren ASTEC-Versionen, analog zur derzeit in ATHLET-CD realisierten und in den vorliegenden Rechnungen verwendeten Verlagerung, als rein axiales Ablaufen von Schmelze entlang der Stabaußenseite (vergleichbar mit dem Abtropfvorgang einer Wachskerze, daher engl. „candling") modelliert. In der aktuell verwendeten ASTEC-Version werden hingegen die verflüssigten oder nicht mehr stabilen Brennstabstrukturen und Strukturmaterialien zunächst in eine sog. Magma-Phase

überführt, die sich dann als Schmelzepool im weiteren Verlauf sowohl axial wie auch radial in benachbarte Kernzonen ausbreiten kann. Dies konnte auch aus den Nachanalysen zum Unfall im Kernkraftwerk Three-Mile-Island (TMI-2) geschlossen werden, nach denen sich im Verlaufe ein Schmelzepool in der Kernregion ausgebildet hatte, der sich schließlich teilweise auch ins untere Plenum verlagerte. Ein solches Magma-Modell scheint mit Blick auf Reaktoranwendungen deutlich realistischer zu sein als die Annahme einer rein axialen Candling-Modellierung, die bei der Simulation von kleinskaligen Experimenten durchaus vielversprechende Ergebnisse zeigte.

Als ein Beispiel zur Modellierung der Kernzerstörung in ASTEC ist in Abb. 4.13 zu drei ausgezeichneten Zeitpunkten der jeweilige RDB-Zustand mit Kern dargestellt, sowie er auch von ICARE modelliert wird. Die Bereiche oberhalb der Kernregion werden weiterhin von CESAR modelliert und sind in dieser automatisch generierten Visualisierung durch ASTEC nicht abgebildet. Die linke Abbildung zeigt den RDB zum Zeitpunkt des Beginns der Spaltproduktfreisetzung, die mittlere Abbildung den Zeitpunkt der erstmaligen Verlagerung von Schmelze ins untere Plenum und die dritte Abbildung schließlich den Zeitpunkt des RDB-Versagens. Dabei lassen sich jeweils drei Informationen aus den Abbildungen herauslesen. Zum einen ist farbcodiert die Temperatur der Strukturen wiedergegeben. Weiterhin ist der aktuelle Wasserstand im RDB eingezeichnet und schließlich lässt sich der Zerstörungszustand des Kerns grob ablesen. So zeigt die linke Abbildung z. B., dass bei Beginn der SP-Freisetzung der Kern noch zu mehr als 50 % mit Wasser bedeckt, die Oberkante aber schon deutlich aufgeheizt ist. Die Brennstabtemperaturen liegen dann bei über 1 000 K. Die mittlere Abbildung zeigt, dass ASTEC eine Verlagerung von Schmelze ins untere, mit Wasser gefüllte Plenum berechnet. Zwar existieren Modelle in ASTEC, die Phänomene wie Fragmentation des Schmelzestrahls, Dampfbildung, Schmelzeschichtung, Bildung eines Hot-Spots etc. vereinfacht modellieren. Mit den vorhandenen Modellen lassen sich zumindest ansatzweise gerade solche Phänomene berücksichtigen, die maßgeblich auch den Unfallablauf im Kernkraftwerk TMI-2 (Three Mile Island) beeinflusst haben. Trotzdem können die Modelle, die entsprechend des Anspruchs eines Integralcodes mit Blick auf die Rechenzeit vereinfacht sind, nur Tendenzen aufzeigen. Spezielle Phänomene, deren Wirkung auch heute noch Diskussionsgegenstand sind, wie z. B. das mögliche Eindringen von Wasser entlang kleiner, sich bildender poröser Strukturen zwischen Schmelzepool und RDB-Wand zur thermischen Entkopplung der beiden Systeme, können derzeit gar nicht realistisch abgebildet werden. Insofern sind Aussagen zum RDB-Versagen nur eingeschränkt belastbar. Für den Zeitpunkt des RDB-Versagens selbst ist im dritten Schaubild von Abb. 4.13 schließlich der Kernzustand wiedergegeben. Es zeigt auch

den mit ASTEC berechneten Zustand der Bodenkalotte, die bei dieser Rechnung schon ein partielles Schmelzen der Wand anzeigt. Auch zeigt die Abbildung deutlich, dass nach Zerstörung der Kernumfassung und des Kernmantels aufgrund von Wärmstrahlung die RDB-Wand schon deutlich aufgeheizt und teilweises Aufschmelzen zu sehen ist. Eine Absicherung dieses Ergebnisses steht zurzeit noch aus, da dies weder von MELCOR noch von ATHLET-CD gerechnet wird. Dieses Verhalten sollte zukünftig eingehender betrachtet werden, da sich prinzipiell andere Freisetzungspfade ergeben, wenn die kernumfassenden Strukturen zerstört sind.

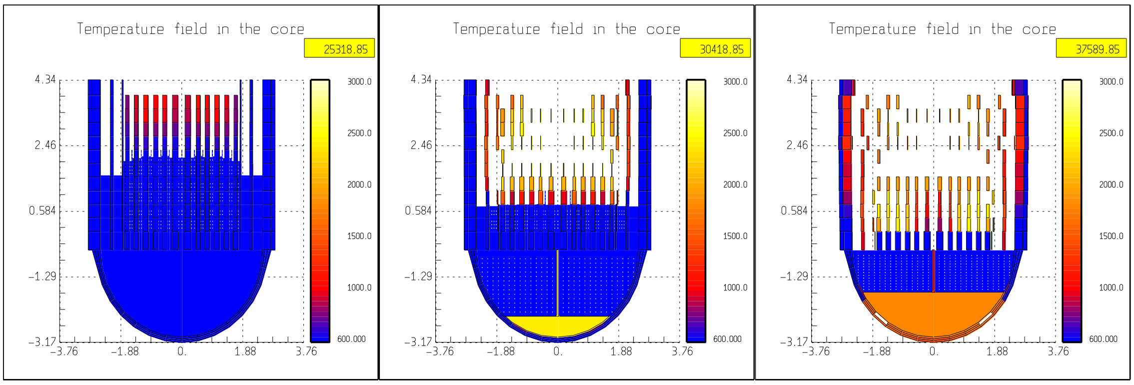


Abb. 4.13 Kernzustände zum Zeitpunkt erstmaliger Spaltproduktfreisetzung (25 300 s, links), der Verlagerung von Schmelze ins untere Plenum (30 200 s, mittig) und zum Zeitpunkt des RDB-Versagens (ca. 37 500 s, rechts)

Insgesamt zeigen die Ergebnisse der Analysen durch GRS mit ASTEC-V2.0 eine deutliche Verbesserung auf, wobei der Fokus auf der In-Vessel-Phase lag, auch wenn die Ex-Vessel-Module im Datensatz berücksichtigt wurden und in der Rechnung aktiviert worden sind, um die Ablauffähigkeit zu testen. Der Vergleich mit dem Integralcode MELCOR und dem mechanistischen Codesystem ATHLET-CD/COCOSYS zeigt in der frühen Phase eine akzeptable Übereinstimmung, aber schon der Zeitpunkt des Eintritts in die Kernzerstörungsphase wird von allen Codes unterschiedlich prognostiziert, was im weiteren Verlauf zu einer weiteren Divergenz der Rechnungen führt.

An dieser Stelle muss nochmals deutlich darauf hingewiesen werden, dass einerseits die Modellbasis der Codes sehr unterschiedlich ist (Stichwort *Candling* und *Magma-Bildung*), und andererseits sind die Modelle als auch die Detaillierung der Nodalisierung selbst sehr sensitiv, so dass die Kernzerstörung selbst große Bandbreiten auch innerhalb eines Codes erwarten lässt. Dies scheint zumindest für die ASTEC-Modelle zu gelten, wie Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen, die aktuell im Vorhaben

RS1504 durchgeführt werden, zeigen. Diesem Verhalten sollte zukünftig mehr Aufmerksamkeit gewidmet werden, um zu beurteilen, welche Auswirkungen die damit verbundenen Unsicherheiten auf Zeitpunkt und Größe des Quellterms haben. Mit Übergang der aktuell verfügbaren ASTEC-Version V2.0 auf die Version V2.1 ist eine weitere Verbesserung zu erwarten, da dann die oftmals kritisierte Kopplung von ICARE und CESAR insofern wegfällt, als dass dann die Thermohydraulik komplett von CESAR gerechnet wird, also auch im Kern, ICARE dann nur noch die eigentliche Kernzerstörung rechnet und zudem von Beginn an aktiviert ist, so dass insbesondere Probleme im Zusammenhang mit der Umschaltung von CESAR auf CESAR/ICARE beseitigt werden. Zudem wird dann die bisher nur testweise erfolgte und auf die Thermohydraulik beschränkte Anwendung auf Siedewasserreaktoren auch auf die Kernzerstörung ausgeweitet werden.

4.3.1.3 Regressionstesten, Anwendung für SWR

Beim Regressionstesten für ASTEC/CPA im Validierungsvorhaben sind signifikante Unterschiede zwischen ASTEC/CPA und COCOSYS bei dem Rechenfall für einen SWR der Baulinie 72 aufgetreten /NOW 12/, der einen Testfall für ein SWR-Containment darstellt. Daraufhin sind die Ursachen für diese Unterschiede untersucht worden. Die hier beschriebenen Ergebnisse sind bereits in den SARNET2-Berichten /REI 13, Seite 38/ und /CHA 13, Seite 192/ dargestellt worden.

Die folgenden Rechnungen betrachten das Containment eines deutschen SWR der 72er-Baulinie. Der Eingabedatensatz wurde ursprünglich erstellt, um die Wasserstoffverteilung im Falle des fiktiven schweren Unfalls „Verlust der Hauptwärmesenke, Ausfall der Druckbegrenzung“ in der deutschen PSA-Studie für SWR zu simulieren. Der untersuchte Fall wird bei /KER 98/ (S. 305) abgekürzt als „HWDB“ dargestellt. Bei diesem Ereignisablauf steigt der Druck im Reaktordruckbehälter, bis es zum Versagen einer Komponente kommt. Bei Erreichen von 12 MPa wird angenommen, dass der Deckelflansch des RDB bleibend undicht wird. Dabei wird eine Leckfläche von 0.2 m² unterstellt. Der ASTEC-Eingabedatensatz beruht auf dem originalen COCOSYS-Datensatz.

Der verwendete ASTEC-Datensatz besteht aus 50 Zonen. Der Druckabbau aus dem Containment (Drywell) erfolgt über Kondensationsrohre in die Wasservorlage der Kondensationskammer (Wetwell), in deren Poolbereich der ausströmende Wasserdampf kondensieren kann. Zonennamen, die zum Drywell gehören, beginnen mit R, z. B.

R10, und Zonen, die zum Wetwell gehören, mit K, z. B. K21. Das Druckabbausystem ist in zwei Bereiche unterteilt. Die Pool-Regionen des Druckabbausystems werden von den Zonen K21 und K22 simuliert. Die Atmosphäre des Drywells ist in den Zonen R10 und R11 über JUNCTIONS mit den Poolbereichen der Wetwell Zonen K21 und K22 verbunden. Dabei wird die INSERTION-Option als schnell laufendes vereinfachtes Modell zur Beschreibung des Druckabbausystems benutzt, welches den Fokus auf die quasi-stationäre Dampf/Gas-Strömung in die Wasservorlage legt. Für die genauere Beschreibung des benutzten Datensatzes und des Szenarios wird auf die SARNET2 Berichte /CHA 13, REI 13/ verwiesen.

Im Folgenden werden Vergleiche zwischen ASTEC-V2.0r2 und der COCOSYS-Entwicklerversion von Januar 2013 dargestellt. Abb. 4.14 zeigt die Temperaturen in der Drywell Zone R10 und der dazugehörigen Wetwell Zone K21. Die berechneten Temperaturen in der COCOSYS-Version steigen schneller als in CPA und bis auf einen Wert von 320 °C zum ersten Venting-Zeitpunkt bei 22 000 s und im Wetwell auf mehr als 150 °C. CPA berechnet zu diesem Zeitpunkt Werte von 275 °C und 100 °C. Der Start der Druckentlastung ist zum gleichen Zeitpunkt, was durch eine plötzliche Abnahme der Temperatur sichtbar wird, bei etwa 22 000 s und 56 000 s. Der prinzipielle Verlauf für die Zonen R11 und K22 ist derselbe wie für die Zonen R10 und K 21, wird an dieser Stelle aber nicht gezeigt. Diese beobachteten hohen Temperaturunterschiede von etwa 50 °C sind die Motivation für den durchgeführten Vergleich von Wärmeübergangsmodellen in COCOSYS und ASTEC/CPA speziell an der Oberfläche von Nichtgleichgewichtszonen.

Der Gesamtdruck in den Zonen R10 und K21 wird dargestellt in Abb. 4.15. Die COCOSYS- und CPA-Ergebnisse sind beinahe identisch. Der Druck steigt an, bis er einen Wert von 7 bar im Wetwell erreicht, denn die Druckentlastung wird bei einem Überdruck von 6 bar von der Wetwell Zone K14 zur Umgebung initiiert. Beendet wird die Druckentlastung, wenn ein Wert von 1.6 bar unterschritten wird. Danach steigt der Druck wieder und COCOSYS und CPA liefern übereinstimmende Ergebnisse auch nach der zweiten Druckentlastung.

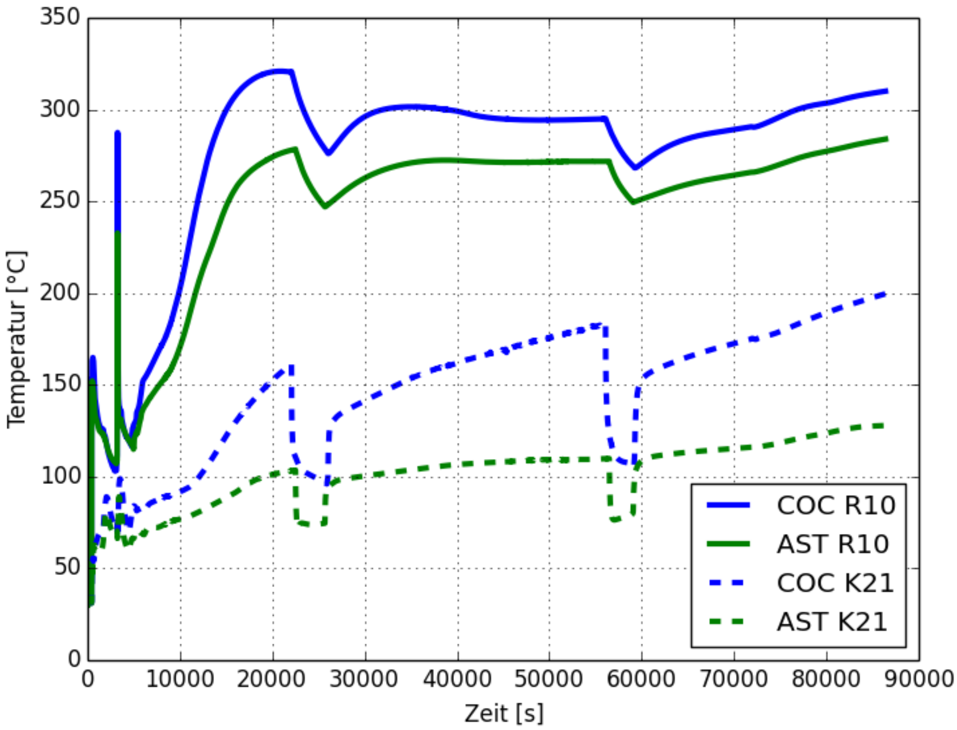


Abb. 4.14 Ausgangssituation: Gastemperaturen in R10 und K21

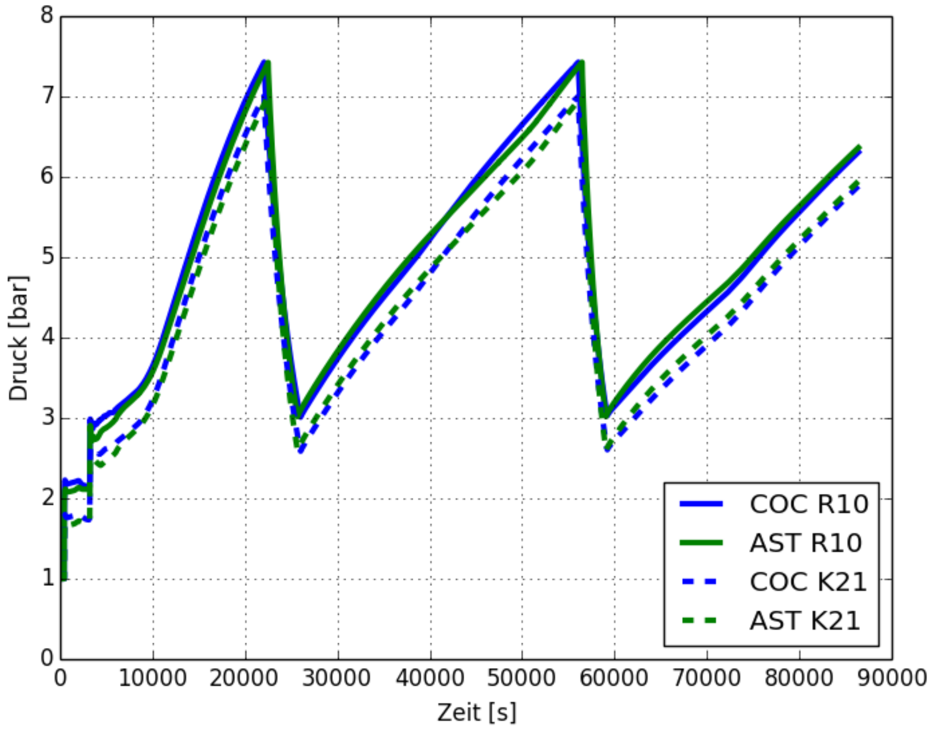


Abb. 4.15 Ausgangssituation: Druck in R10 und K21

Ergebnisse mit identischer Option für den Wärmeübergang an der Sumpfoberfläche

In COCOSYS ist es für Nichtgleichgewichtszonen mit Setzen der Option SUHT = AST möglich, anstatt der Standardoption (SUHT = COC) dieselben Wärmetransport-übergangs-Modelle für die Sumpfoberfläche wie in ASTEC/CPA zu verwenden. Mithilfe dieser Option ist es möglich, evtl. Ursachen für die genannten Unterschiede zwischen COCOSYS und CPA zu isolieren. Abb. 4.16 zeigt einen Vergleich der Temperaturen in den Zonen R10 und K21 der COCOSYS-Version mit SUHT = AST mit denselben CPA-Ergebnissen wie in Abb. 4.14. COCOSYS liefert auch hier höhere Temperaturen im Drywell, allerdings sind die Temperaturen im Wetwell beinahe identisch in COCOSYS und CPA. Dieses Ergebnis legt nahe, dass die Unterschiede zwischen COCOSYS und ASTEC/CPA zu einem großen Teil aus unterschiedlichen Wärmetransportmodellen der Sumpfoberfläche im Nichtgleichgewichts-Zonenmodell folgen.

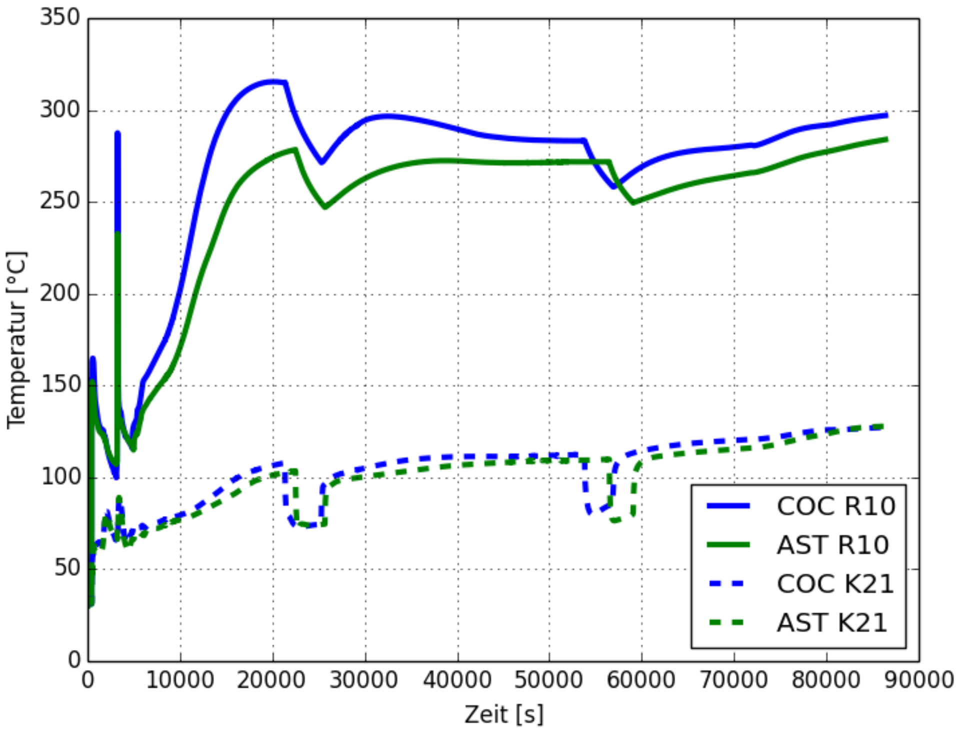


Abb. 4.16 SUHT_AST-Option: Gastemperaturen in R10 und K21

Das COCOSYS-Ergebnis für den Druck mit der Option SUHT = AST steigt ein wenig schneller als in CPA, wie Abb. 4.17 zeigt. Die erste Druckabbauphase wird jetzt einige hundert Sekunden und die zweite Druckabbauphase 2 000 s eher erreicht.

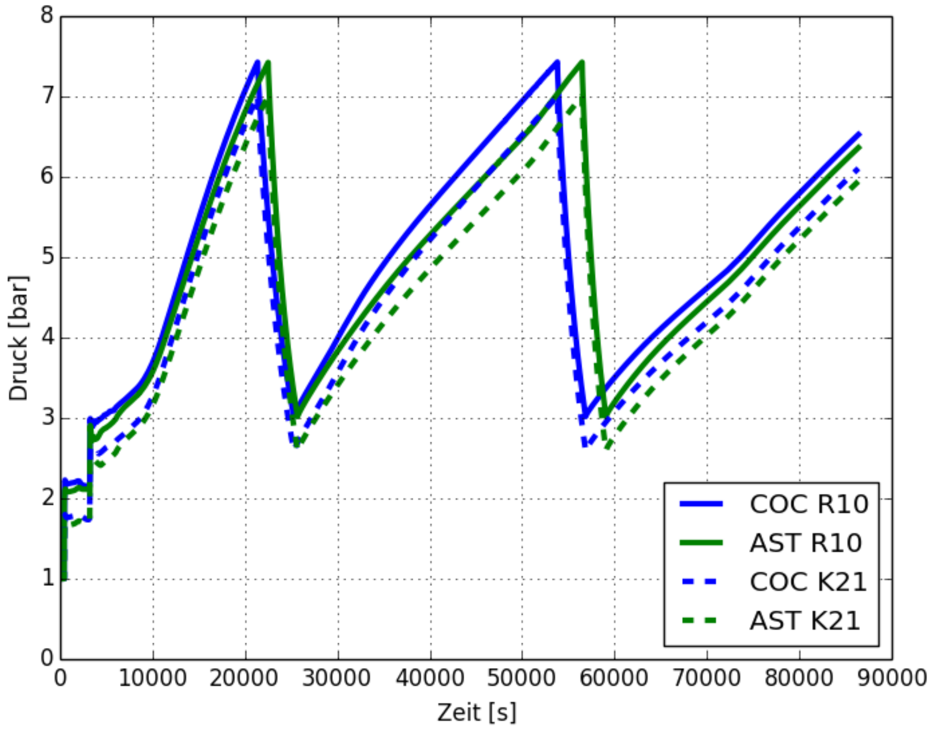


Abb. 4.17 SUHT_AST-Option: Drücke in R10 und K21

Ergebnisse mit geändertem CPA-Wärmetransport an der Sumpfoberfläche

Die Unterschiede in den Wärmetransportmodellen der COCOSYS-Unterprogramme „SUHT_COC.f" und „SUHT_AST.f" sind untersucht worden, wobei letztere die Wärmetransportmodelle aus der ASTEC-Routine „ZDER2.f" verwendet. Dabei ist eine Korrelation identifiziert worden, die den Hauptunterschied zwischen COCOSYS und CPA verursacht. Die Details dieser Modellunterschiede werden im nächsten Abschnitt behandelt. In den folgenden CPA-Ergebnissen ist diese Gleichung aus den CPA-Quellen durch die originale COCOSYS-Version ersetzt worden.

Abb. 4.18 zeigt den Temperaturverlauf der geänderten CPA-Version in Vergleich mit den originalen COCOSYS-Ergebnissen. Der mit CPA berechnete Temperaturanstieg in der Drywell-Atmosphäre ist nicht so stark wie im COCOSYS-Ergebnis, aber die Ergebnisse mit COCOSYS und CPA für den Temperaturanstieg in der Wetwell-Atmosphäre sind nun in besserer Übereinstimmung. Das bedeutet, dass der von CPA berechnete Temperaturanstieg in der Wetwell-Atmosphäre jetzt wesentlich größer ist, als mit der ursprünglich verwendeten Gleichung in CPA, wie in Abb. 4.14 zu sehen ist. Der Zeitpunkt der ersten Druckentlastung ist jetzt ein wenig später in der CPA-Rechnung und der Zeitpunkt der zweiten Druckabbauphase ist um 5 000 s verzögert.

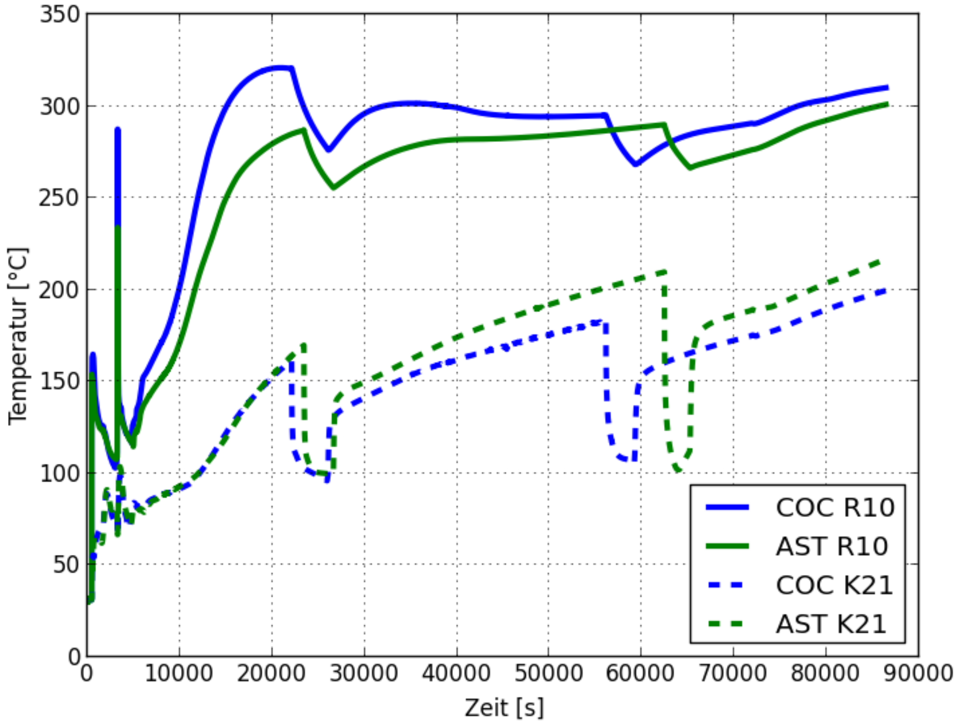


Abb. 4.18 CPA geändert: Gastemperauren in R10 und K21

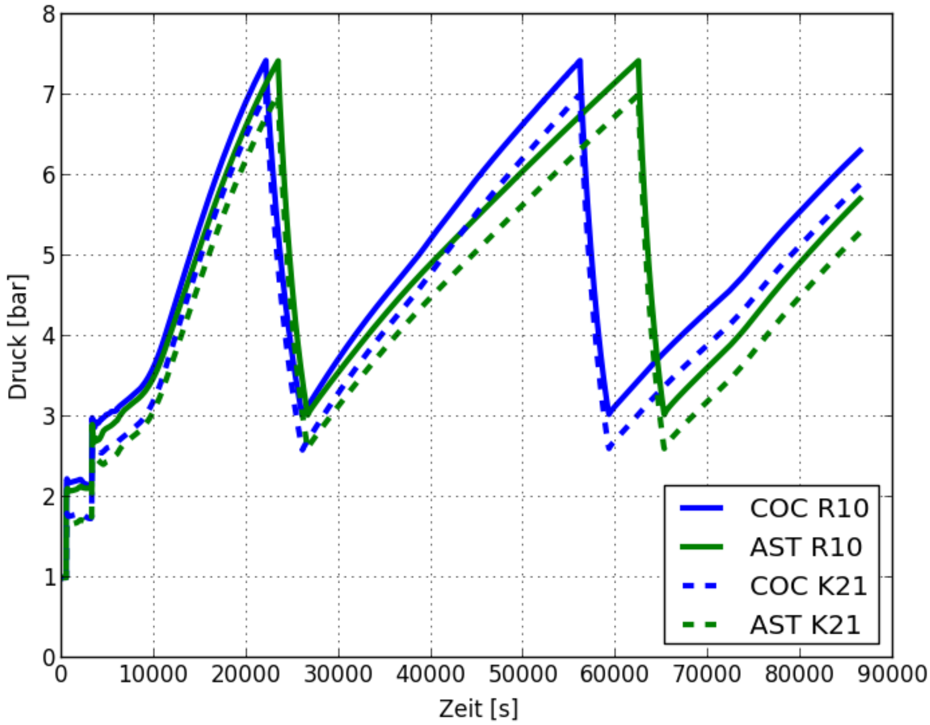


Abb. 4.19 CPA geändert: Drücke in R10 und K21

Der Grund für die verzögerte Druckentlastung wird im Druckverlauf sichtbar, wie in Abb. 4.19 dargestellt. Der Druck in CPA steigt in dieser geänderten Programmversion

langsamer und der Grenzwertdruck wird zu einem späteren Zeitpunkt erreicht. Die erzielten Ergebnisse zeigen eine bessere Übereinstimmung zwischen COCOSYS und CPA bezüglich der Temperaturen in der Wetwell-Atmosphäre, aber nicht für die Geschwindigkeit des Druckaufbaus.

Die dargestellten Ergebnisse geben keinen Rückschluss, welche Version das beste Resultat liefert, da kein Vergleich mit experimentellen Daten vorliegt. Der Druckaufbau als auch die Wärmeverteilung in verschiedenen Zonen und Strukturen ist sehr sensitiv bezüglich der verwendeten Wärmetransportmodelle. Das hat sich in einer weiteren COCOSYS-Rechnung gezeigt, die dieselben Wärmetransportmodelle für Strukturen als auch auf Sumpfoberflächen benutzt wie CPA. Diese Rechnung liefert beinahe identische Ergebnisse für COCOSYS und CPA für den Druckaufbau als auch den Temperaturanstieg in verschiedenen Zonen. Diese Rechnung wird an dieser Stelle nicht gezeigt.

Analyse der unterschiedlichen Sumpf-Wärmeübergangsmodelle

Abb. 4.20 zeigt einen Quellcodevergleich zwischen den COCOSYS-Quelldateien „SUHT_COC.f“ auf der linken und „SUHT_AST.f“ (entspricht CPA-Unterprogramm „ZDER2.f“, Zeilen 159 und folgende im CVS-Zweig b-2009-02-16, rev. 1.21.4.4) auf der rechten Seite. Gezeigt wird die Berechnung der Nußelt-Zahl für Freie Konvektion auf Sumpfoberflächen in Nichtgleichgewichts-Zonen. Der IF-Zweig berechnet die Nußelt-Zahl für den Fall eines wärmeren Sumpfes im Vergleich zur Atmosphäre. Dieser Teil ist in beiden Versionen identisch. Der ELSE-Zweig berechnet Bedingungen eines kalten Sumpfes bei einer wärmeren Atmosphäre. Aufgrund der ersten Änderung wird nur eine Warnung ausgegeben, falls einige Parameter außerhalb der Bandbreite sind; diese spielt hier keine Rolle. Der entscheidende Teil ist unterhalb der Kommentarzeile „C----TURBULENT CASE“ in „SUHT_AST.f“. Dieser Teil fehlt komplett in „SUHT_COC.f“. Der Ursprung dieses Unterschieds konnte nicht festgestellt werden. CVS-logs sind verfügbar bis zurück zu ASTEC-Version 0.3 (frühester Eintrag vom 16. August 2000). Bereits in dieser ältesten Version ist diese Änderung in der Routine „ZDER2.f“ vorhanden. Im Gegensatz dazu ist dieser Code in keiner Version von COCOSYS oder des thermohydraulischen Vorgängercodes RALOC vorhanden.

```
C
C---- CALCULATION OF NU FOR FREE CONVECTION
C
            IF (ZTEMP(2,IZ).GT.ZTEMP(1,IZ)) THEN
               F2 = 1.D00/(1.D00 + (.322D00/PPR(IZ))**D12)**D21
               FAK = RA*F2
               IF (FAK.LE.RAG) THEN
                  FNU = .766D00*FAK**D15
               ELSE
                  FNU = .15D00*FAK**D13
               ENDIF
               F2 = 1.D00/(1.D00 + (.322D00/PPR2)**D12)**D21
               FAK = RA2*F2
               IF (FAK.LE.RAG) THEN
                  FNU2 = .766D00*FAK**D15
               ELSE
                  FNU2 = .15D00*FAK**D13
               ENDIF
            ELSE
               F1 = 1.D00/(1.D00 + (.492D00/PPR(IZ))**D91)**D19
               FAK = RA*F1
               IF (FAK.LT.1.D-9) THEN
                  FAK = 1.D-9
               ELSEIF (FAK.GT.1.D10) THEN
                  IF (.NOT.LMESS) THEN
                     CALL SERO ('SUHT_COC',4,4,'FAKTOR OUT OF REGION ',
     *                    'FOR FREE CONVECTION, FAK > 10**10, ONLY ONE
     *                    //' MESSAGE!')
                     LMESS = .TRUE.
                  ENDIF
               ENDIF
               FNU = .6D00*FAK**D15
               F1 = 1.D00/(1.D00 + (.492D00/PPR2)**D91)**D19
               FAK = RA2*F1
               IF (FAK.LT.1.D-9) FAK = 1.D-9
               FNU2 = .6D00*FAK**D15
            ENDIF
```

```
C
C---- CALCULATION OF NU FOR FREE CONVECTION
C
            IF (ZTEMP(2,IZ).GE.ZTEMP(1,IZ)) THEN
               F2 = 1.D00/(1.D00 + (.322D00/PPR(IZ))**D12)**D21
               FAK = RA*F2
               IF (FAK.LE.RAG) THEN
                  FNU = .766D00*FAK**D15
               ELSE
                  FNU = .15D00*FAK**D13
               ENDIF
               F2 = 1.D00/(1.D00 + (.322D00/PPR2)**D12)**D21
               FAK = RA2*F2
               IF (FAK.LE.RAG) THEN
                  FNU2 = .766D00*FAK**D15
               ELSE
                  FNU2 = .15D00*FAK**D13
               ENDIF
            ELSE
               F1 = 1.D00/(1.D00 + (.492D00/PPR(IZ))**D91)**D19
               FAK = RA*F1
               IF (FAK.LT.1.D-9) FAK = 1.D-9
               FNUL = .6D00*FAK**D15
               F1 = 1.D00/(1.D00 + (.492D00/PPR2)**D91)**D19
               FAK = RA2*F1
               IF (FAK.LT.1.D-9) FAK = 1.D-9
               FNU2L = .6D00*FAK**D15
C
C---- TURBULENT CASE
C
               X = DLOG(RA)
               X2 = DLOG(RA2)
               FNUT = DEXP((A*X + B)*X + C)
               FNU2T = DEXP((A*X2 + B)*X2 + C)
               FNU = MAX(FNUL,FNUT)
               FNU2= MAX(FNU2L,FNU2T)
            ENDIF
```

Abb. 4.20 Codevergleich zwischen SUHT_COC.f (COCOSYS) und SUHT_AST.f (wie in CPA, ZDER2.f)

Die Korrelation in diesem Teil des CPA-Unterprogramms „ZDER2.f“ ist identifiziert worden als sogenannte Krischer-Korrelation und ist in der GRS von Hüttermann /HUE 90/ anhand der Krischer-Kurve aus dem VDI-Wärmeatlas /VDI 74/ abgeleitet worden. Diese berechnet die Nußelt-Zahl *Nu* aus der Grashof-Zahl *Gr* und der Prandtl-Zahl *Pr*.

$$\rho_g \qquad Nu = e^{ax^2+bx+c} \quad \text{mit} \quad x = Gr * Pr \qquad (4.1)$$

mit den Koeffizienten:

$$a = 0{,}0048, b = 0{,}1166, c = 0{,}3292 \qquad (4.2)$$

Diese Korrelation wird normalerweise benutzt, um die Nußelt-Zahl für freie Konvektion an allgemeinen vertikalen Oberflächen zu berechnen. Dieses ist nicht der Fall für horizontale Sumpfoberflächen. Der Kommentar bezüglich eines turbulenten Falls gibt einen falschen Hinweis.

In der Schlussfolgerung zu den Untersuchungen ist die fragliche Anwendung dieser Korrelation in der ASTEC-Version V2.1 entfernt worden.

4.3.2 CSNI/WGAMA-Aktivitäten

4.3.2.1 State of the Art Report zu MCCI

Nach Ende des OECD-MCCI2-Projektes wurde als eine der Schlussfolgerungen im Rahmen des Abschlussseminars zum genannten Projekt dem CSNI empfohlen, einen State-of-the-Art-Bericht zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung zu verfassen. Dieser Bericht soll auch die Kühlbarkeit einer Ex-Vessel-Schmelze betrachten. Die Aktivität ist von der WGAMA aufgegriffen worden und die GRS hat sich hieran aktiv in einer entsprechenden *task group* beteiligt. Die Arbeitsgruppe setzt sich aus folgenden Instituten zusammen: AREVA (Deutschland), ANL (USA), CEA (Frankreich), CSN (Spanien), EDF (Frankreich), FAI (USA), GRS (Deutschland), IBRAE (Russland), IRSN (Frankreich), KIT (Deutschland), JNES → NRA (Japan), NRC (USA), RSE (Italien), wobei FAI, IBRAE und RSE erst in 2013 dazu gestoßen sind.

Das Kick-off-Treffen fand im April 2012 statt. Die GRS hat an den darauf folgenden Treffen der Gruppe teilgenommen (zweites Treffen der Gruppe in Cadarache, November 2012, drittes Treffen in Paris, September 2013, viertes Treffen in Cadarache, Mai 2014). Die ursprüngliche Zielsetzung für die Fertigstellung des Berichtes war Juni 2014. Bei Aufnahme der Arbeiten wurden zunächst die Struktur des Berichtes, die verantwortlichen Kapitel-Hauptautoren sowie die Zuordnung von weiteren Autoren/Beiträgen zu einzelnen Kapiteln festgelegt.

Der letzte Entwurf (September 2014) sieht folgende Struktur des Berichtes vor:

- Kapitel 1: Einleitung und Vorstellung der Haupt-Phänomene. Kurze Beschreibung der Unfall-Phänomenologie
- Kapitel 2: Status der Experimente zu MCCI und zur Kühlbarkeit
- Kapitel 3: Die wichtigsten Simulations-Tools und Modelle
- Kapitel 4 : Status von Modellierung und Modellunsicherheiten
- Kapitel 5 : Anwendung auf die Reaktoranlagen (wird neu erstellt)
- Kapitel 6 : Schlussfolgerungen

Aufgrund inhaltlicher Schwierigkeiten wurde auf dem 4. Treffen der Gruppe eine neue Ausrichtung des Kapitels 5 beschlossen: Es soll sich realistischen Reaktorbedingungen zuwenden, indem ein Satz von „generischen realistischen“ Konfigurationen (bestehend aus der Topologie der Räumlichkeiten, geometrischen Inhomogenitäten, dem Zustand der Schmelze, der Verfügbarkeit von Wasser etc.) definiert wird, der die möglichen unterschiedlichen Szenarien weitgehend abdeckt. Auf dieser Basis sollen noch fehlende Phänomene oder Funktionalitäten in der Modellpalette identifiziert werden und es sollen Richtlinien für die Durchführung von Analysen erarbeitet werden.

Ein vollständiger Gesamtentwurf des SOAR soll Ende 2014 vorliegen. Im Winter 2014/2015 ist ein letztes Treffen der Arbeitsgruppe geplant, und eine Überarbeitung des Berichtes durch WGAMA und CSNI ist für das Frühjahr 2015 anvisiert. Der Bericht soll Mitte 2015 fertig gestellt werden.

4.3.2.2 CSNI State-of-the-Art Report zu gefilterten Druckentlastungssystemen

Die Aktivität der Arbeitsgruppe WGAMA des CSNI zur Erstellung eines State-of-the-Art Reports zum Stand der Implementierung von gefilterten Druckentlastungssystemen für Sicherheitsbehälter wurde nach Fukushima gestartet. Ein erster derartiger Bericht des CSNI datiert zurück auf 1988. Zielsetzung war es, den Stand der Implementierung derartiger Systeme sowie die nationalen Anforderungen aus den jeweiligen Regelwerken zusammenzustellen. Darüber hinaus sind im Anhang verschiedene Systeme näher beschrieben. Der Bericht sieht folgende Gliederung vor:

- Chapter 2 General background and objectives of the Status Report
- Chapter 3 Status of filtered containment venting regulatory requirements
- Chapter 4 Status of implementation of filtered containment venting systems
- Chapter 5 Filtered containment venting strategies in EOP and SAMG domains
- Chapter 6 Description of different filtered containment venting system technologies
- Chapter 7 Recommended design specifications for filtered containment venting systems
- Chapter 8 Source term evaluations in view of filtered containment venting systems

– Chapter 9 Summary of benefits expected from filtered containment venting and possible adverse aspects

– Chapter 10 Identification of possible improvements of containment venting systems/strategies

– Chapter 11 Concluding remarks

– APPENDIX 1 - Technical description of French FCVS

– APPENDIX 2 - Technical description of Westinghouse FCVS

– APPENDIX 3 - Technical description of CCI FCVS

– APPENDIX 4 - Technical description of AREVA´s Combined Venturi Scrubber FCVS.

Die Arbeiten wurden von folgenden Partnern aktiv unterstützt:

– Belgien: GdF Suez Tractebel Engineering, Bel V, Westinghouse

– Canada: Atomic Energy Canada Ltd., Canadian Nuclear Safety Commission

– Czechische Republik: UJV Řež (Nuclear Research Institute Rez plc)

– Finnland: STUK (Radiation and Nuclear Safety Authority)

– Frankreich: Electricité de France, Institut de Radioprotetion et de Sûreté Nucléaire

– Germany: AREVA NP GmbH, Forschungszentrum Jülich GmbH, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) mbH

– Japan: Japan Atomic Energy Agency, Japan Nuclear Energy Safety Organization

– Korea (Republic of.): Korea Atomic Energy Research Institute

– Mexiko: Comision Nacional de Seguridad Nuclear y Salvaguardia

– Niederlande: Ministry of Infrastructure and Environment

– Slovakische Republik: Nuclear Regulatory Authority

– Slovenien: Slovenian Nuclear Safety Administration

- Spanien: Consejo de Seguridad Nuclear, Iberdrola S.A., Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas, Universitat Politècnica de Catalunya
- Schweden: Swedish Radiation Safety Authority, Westinghouse
- Schweiz: Paul Scherrer Institute, Swiss Federal Nuclear Inspectorate, IMI Nuclear
- USA: US Nuclear Regulatory Commission.

Beginnend ab 2012 beteiligte sich die GRS hieran aktiv, übernahm die Koordination der Beiträge deutscher Partner insbesondere zum Stand der Implementierung der Ventingsysteme in deutschen Anlagen und war Partner in der „writing group“ des Endberichtes. Die Koordination des Gesamtberichtes oblag IRSN. Im Berichtszeitraum des Vorhabens fanden mehrere Arbeitstreffen statt. Der Statusbericht wurde Anfang 2014 fertiggestellt und im Juni 2014 durch das CSNI freigegeben.

4.3.3 EU-Vorhaben CESAM

Die GRS leitet derzeit das CESAM Projekt im 7. Rahmenprogramm der Europäischen Kommission mit 18 internationalen Partnern. Für die Codeentwicklung sind im Wesentlichen die Arbeiten im CESAM Work Package 20 *„Modelling assessment, improvement and validation (ASSES)“* von Bedeutung. Die GRS trägt hier auch die Verantwortung als *work package leader*. Darüber hinaus bearbeitet die GRS die Themenfelder MCCI, Filtersysteme und Pool-Scrubbing innerhalb dieses Arbeitspaketes. Modelltechnische Erweiterungen in ASTEC werden im Work Package 30 *„Integration of models in ASTEC (INTEG)“* eingepflegt. Hierbei sind je nach Projektverlauf speziell Themen für das Containment Modul CPA relevant.

Erstellte Berichte

Zu Beginn von CESAM sind Berichte erstellt worden, die die Ausgangslage bezüglich der vorhandenen Modelle in ASTEC und der vorhandenen Versuche zusammenfasst, die zur Validierung von ASTEC zur Verfügung stehen. Die Ergebnisse sind in die CESAM Deliverables

- D20.21 „Identification of available experiments for ASTEC validation and needs of new experiments“ /NOW 13b/,

der unter Federführung der GRS erstellt worden ist, und

- D20.22 „Synthesis of needs of ASTEC model improvements for ASTEC V2.1“ /HER 14/,

der federführend von CIEMAT von den WP20 Partnern verfasst worden ist, eingeflossen. Derzeit sind noch die Berichte

- D20.23 „General specifications of new models of model improvements to be implemented into ASTEC V2.1rev1“

unter Federführung von CIEMAT und

- D20.24 „Synthesis of validation of ASTEC V2.1rev0 and rev1 versions“

unter Federführung vom IKE der Universität Stuttgart, in Bearbeitung.

4.3.3.1 Pool-Scrubbing

Für die oben genannten Berichte D20.21 und D20.22 sind die Erfahrungen zum Pool-Scrubbing bezüglich des in COCOSYS und ASTEC/CPA enthaltenen Modells SPARC dargestellt worden. In Bezug auf das CESAM-Arbeitspaket WP20 für die Validierung von ASTEC/CPA stellen die Ergebnisse, die im Abschlussbericht des Validierungsvorhabens RS1190 /KLE 12, Abschnitt 3.1, S. 217/ dargestellt worden sind, noch immer den Status-quo der Pool-Scrubbing-Validierung dar, da es noch keine Modellaktualisierungen gibt. Das Verhalten des SPARC-Modells ist bereits von Fischer /FIS 98/ ausgiebig untersucht worden. Nachfolgende Programmänderungen sind von Schmitz in die letzte COCOSYS-Version SPARC-B/98mod /SCH 03/ eingeflossen. In RS1190 ist untersucht worden, inwieweit die heutigen Versionen in ASTEC/CPA und COCOSYS noch die von Fischer und Schmitz durchgeführten Ergebnisse reproduzieren. Dazu sind die Experimente der Versuchsserien POSEIDON und EPRI-III mit beiden Programmen erneut nachgerechnet worden. Beispielhaft ist für die POSEIDON-Versuchsserie ein Vergleich der verschiedenen SPARC Versionen aus /KLE 12/ in Tab. 4.1 eingefügt.

Daraus ergibt sich folgende Schlussfolgerung: Der Vergleich der 14 Experimente zeigt eine recht gute Übereinstimmung der Dekontaminationsfaktoren (DF) bzw. der Dekontaminationseffizienz (DE) zwischen der aktuellen COCOSYS-Version und der Version SPARC-B/98mod, also den Rechnungen, die von Schmitz durchgeführt worden sind. Größere Abweichungen bestehen hingegen schon zwischen den Versionen SPARC-

B/98, deren Rechnungen von Fischer durchgeführt worden sind, und SPARC-B/98mod. Für die aktuelle ASTEC/CPA Version ergibt sich ein uneinheitliches Bild. Einige Ergebnisse liegen näher an der Version SPARC-B/98 und andere näher an der Version SPARC-B/98mod. Der Vergleich legt die Vermutung nahe, dass die aktuelle COCOSYS-Version noch gut den Stand der Version SPARC-B/98mod von Schmitz widerspiegelt, wobei diese starke Unterschiede zur Version SPARC-B/98 von Fischer aufweist. Dahingegen gibt die aktuelle SPARC-Version in CPA ein anderes Verhalten, das zeigt, dass in ASTEC/CPA Änderungen gemacht worden sind, die unabhängig von den COCOSYS-Versionen sind.

Ähnliche Schlussfolgerungen lassen die Untersuchungen zu den EPRI-III-Experimenten zu, sollen hier aber nicht wiederholt werden. Im Rahmen von CESAM werden die in der GRS gewonnenen Erfahrungen im europäischen Rahmen diskutiert. Informationsrückflüsse ergeben sich insbesondere auch durch eine Partnerschaft zwischen dem CESAM-Projekt und dem FP7 Projekt PASSAM (https://gforge.irsn.fr/gf/project/passam). Bei PASSAM handelt es sich um ein experimentelles Programm, das verschiedene Systeme zur Spaltproduktrückhaltung im Containment testet, in dem unter anderem auch Pool-Scrubbing behandelt wird.

Tab. 4.1 Stand der SPARC-Validierung aus dem Validierungsvorhaben /KLE 12, S. 220/

Nachrechnung der POSEIDON-Experimente																
Lfd. Nr.		**Aerosol**	**Experiment**	**Tiefe**	**Experiment**		**RS979**		**Battelle**		**COCOSYS**		**COCOSYS**		**ASTEC**	
		Größen-verteilung					SPARC-90		SPARC-B/98		SPARC-B/98mod		Heute		Heute	
				[cm]			0,30/1,37									
					DF	DE	DF	DE	DF	DE	DF	DE	DF	DE	DF	DE
1	55 % Dampf	"kleines" Aerosol AMMD/GSD = 0,30/1,37	PA-07	30	6,61	0,8487	7,18	0,8607	1,06	0,0566	1,19	0,1562	1,32	0,24	1,03	0,27
2			PA-06	100	7,30	0,8630	7,11	0,8594	1,19	0,1597	1,64	0,3894	1,85	0,46	1,03	0,03
3			PA-09	200	9,72	0,8971	8,72	0,8853	1,36	0,2647	2,58	0,6129	2,65	0,62	1,07	0,07
4			PA-08	400	21,40	0,9533	10,30	0,9029	2,12	0,5283	3,38	0,7042	3,78	0,74	3,81	0,74
5	kein Dampf		PA-13	30	2,59	0,6136	2,98	0,6644	1,19	0,1597	1,02	0,0150	1,01	0,01	1,05	0,05
6			PA-12	100	3,42	0,7075	2,51	0,6016	1,55	0,3548	1,04	0,0338	1,04	0,04	1,11	0,10
7			PA-11	200	5,35	0,8132	2,81	0,6441	1,71	0,4152	1,06	0,0600	1,09	0,08	1,24	0,20
8			PA-10	400	10,63	0,9059	2,84	0,6479	2,28	0,5614	1,33	0,2465	1,37	0,27	2,15	0,53
9	> 70 % Dampf		PA-21	30	2,45	0,5917	13,57	0,9263	1,09	0,0826	1,46	0,3162	1,52	0,34	1,05	0,05
10			PA-15	100	4,86	0,7944	15,90	0,9371	1,26	0,2063	2,84	0,6476	2,94	0,66	1,03	0,03
11			PA-20	200	5,11	0,8043	21,11	0,9526	1,53	0,3464	4,21	0,7623	4,40	0,77	4,11	0,76
12			PA-14	400	14,62	0,9316	21,82	0,9542	2,24	0,5536	4,65	0,7849	4,93	0,80	6,36	0,84
13		"großes" Aero-sol	PA-17	100	12,33	0,9189	21,98	0,9545	2,15	0,5349	2,97	0,6635	3,09	0,68	1,18	0,15
14		AMMD/GSD = 0,54/1,69	PA-16	400	38,94	0,9743	43,44	0,9770	10,87	0,9080	6,61	0,8486	7,14	0,86	15,99	0,94

4.3.3.2 Gefilterte Druckentlastung

Wie bereits in Abschnitt 2.3.3 erläutert, ist in diesem Vorhaben ein Modell für Metallfaserfilter-Ventingfilter (MMFVF) entwickelt worden. Dieses berücksichtigt einen höheren Druckverlust am aerosolbeladenen Filter im Vergleich zu einem leeren Filter. Außerdem wird die Abscheidung von Iod im Sorptionsfilter berechnet. Darüber hinaus kann mit COCOSYS eine Kalibrierung an Messwerte eines spezifischen Filters durchgeführt werden. Dieses neue MMFVF-Modell ist bisher nicht nach ASTEC/CPA transferiert worden. In ASTEC sind drei unterschiedliche Filtermodelle (FIBRE, GRANULAT und CRACK) vorhanden. Das Modell für Faserfilter (FIBRE) berechnet zwar die Abscheidung der Aerosolpartikel in Abhängigkeit der Größenklassen des einströmenden Aerosols. Eine Rückwirkung auf den Druckverlust durch die Filterbeladung sowie von Iodprozessen ist in ASTEC aber nicht möglich. Auch eine Kalibrierung des Filtermodells an Messergebnissen für einen spezifischen Filter kann in ASTEC nicht automatisch durchgeführt werden. In COCOSYS steht im Filtermodell die Möglichkeit zur Verfügung, den Druckverlust und die Effizienz eines speziellen Filters anhand von Kalibrierungsversuchen mit einem Testaerosol anzupassen.

Innerhalb des Arbeitspaketes CESAM WP20 sind Vergleiche des neuen COCOSYS-Modells mit den in ASTEC/CPA vorhandenen Filtermodellen durchgeführt worden. Dazu sind die ACE-Versuche AA19 und AA20 mit ASTEC modelliert worden. Die Ergebnisse sind mit vorhandenen COCOSYS-Rechnungen zu diesen Experimenten verglichen worden. Die Ergebnisse werden detailliert im CESAM-Bericht D20.24 „Synthesis of validation of ASTEC V2.1rev0 and rev1 versions“ erläutert, weswegen hier nur auf die wichtigsten Ergebnisse zum Versuch AA19 eingegangen wird.

In Abb. 4.21 ist die Gasgeschwindigkeit innerhalb des Metallfaserfilters für beide Codes aufgetragen. Die ASTEC-Rechnung zeigt nach einer kurzen Ausgleichsphase zu Beginn der Gas- und Aerosoleinspeisung konstante Gasgeschwindigkeiten bis zum Abschalten der Aerosoleinspeisung mit gleichzeitiger Verringerung der Einspeiserate nach 30 min. COCOSYS hingegen zeigt eine kontinuierlich abnehmende Gasgeschwindigkeit während der Aerosoleinspeisung. Dieses Verhalten ist auf die Zunahme des Widerstandsbeiwertes durch die Aerosolablagerung zurückzuführen, die in COCOSYS im Gegensatz zu CPA berechnet wird. CPA liefert daher keinerlei Rückwirkung des beladenen Filters auf die thermodynamischen Randbedingungen innerhalb des Experimentaufbaus.

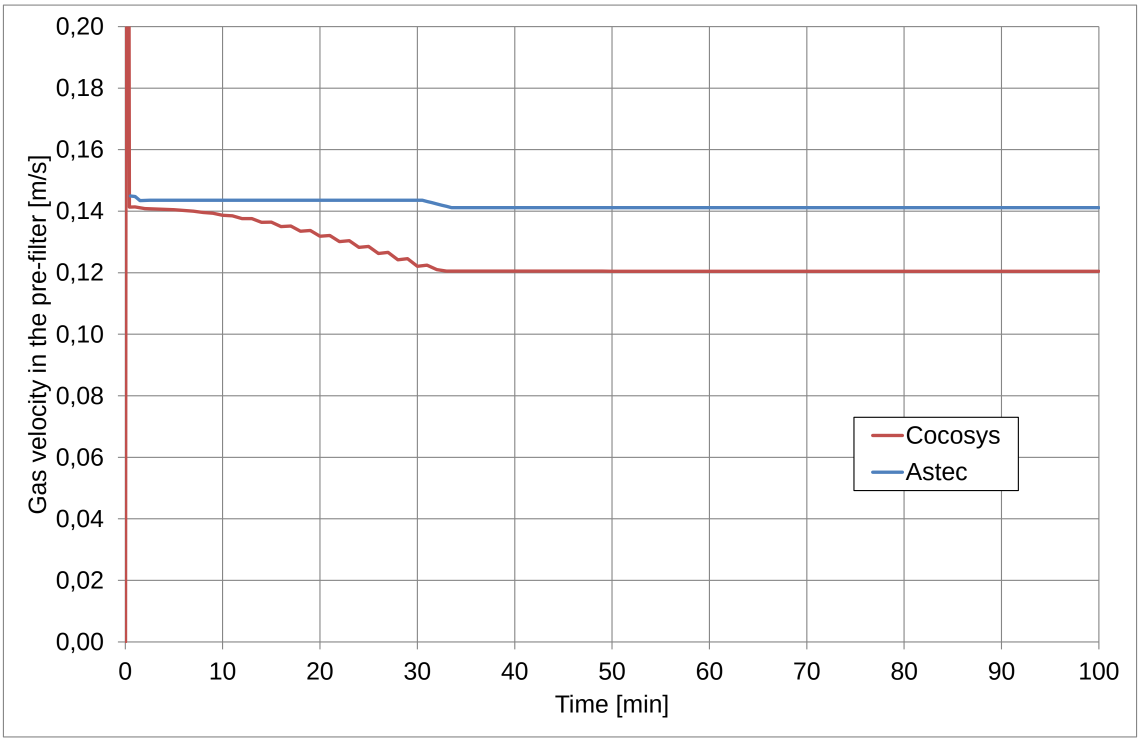


Abb. 4.21 Gasgeschwindigkeit innerhalb des Metallfaserfilters mit COCOSYS und ASTEC

Die abgelagerten Aerosolmassen in den verschiedenen Filterstufen des Metallfaserfilters sind in Abb. 4.22 für COCOSYS und ASTEC aufgetragen. Beide Codes berechnen die größte Ablagerung in der Vorfilterstufe 5. Das generelle Verhalten beider Codes ist ähnlich mit einer Zunahme der Ablagerung bis zu Vorfilter 5 und einer Abnahme in den folgenden Filterstufen. Der Vergleich dieser absoluten Ablagerungsmengen zeigt also ein ähnliches Verhalten für beide Programme, was auch durch einen Modellvergleich der verwendeten Korrelationen in den Faserfiltermodellen deutlich wird. Beide Modelle verwenden dieselben Ausgangsgleichungen zur Berechnung der Größenklassenabhängigen Abscheidung in den verschiedenen Filterstufen.

Im Hinblick auf die Bestimmung des Dekontaminationsfaktors ist ein relativer Vergleich der einströmenden Aerosolmasse zur austretenden Aerosolmasse maßgeblich. Der Dekontaminationsfaktor (DF) wird als Quotient dieser beiden Größen gebildet. Typischerweise ist die Ausgangsmasse klein gegenüber der Eingangsmasse, weshalb der DF große Werte annehmen kann, wobei die abgelagerte Masse im Filter integral ähnlich sein kann, sich aber die Werte für durchgelassene Aerosolpartikel trotzdem signifikant unterscheiden können.

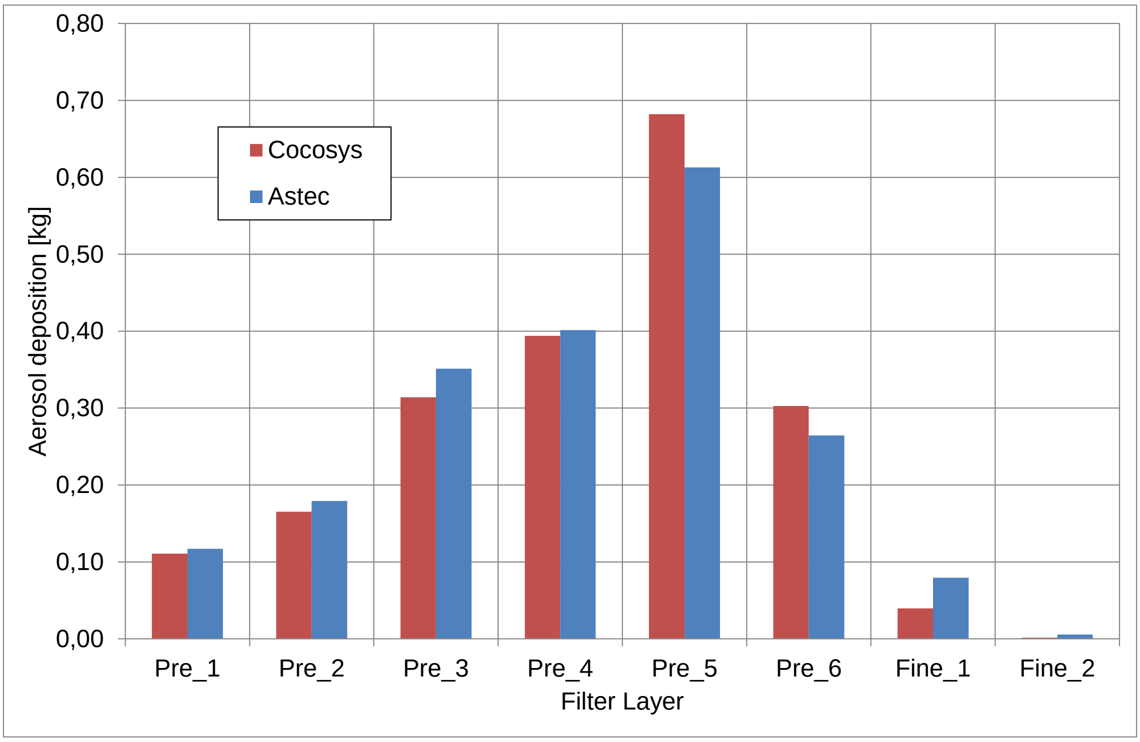


Abb. 4.22 Abgelagerte Aerosolmasse in den unterschiedlichen Filterstufen mit COCOSYS und ASTEC

Abb. 4.23 zeigt einen Vergleich des DF zwischen COCOSYS und ASTEC. Während COCOSYS einen DF im Bereich von 10^7 zurückgibt, berechnet ASTEC nur einen Wert von 10^4. Der relative Anteil des durch den Filter freigesetzten Aerosols ist in der CPA-Rechnung also um 3 Größenordnungen größer als in der COCOSYS-Rechnung. Im Experiment konnte der DF nicht exakt bestimmt werden, da er oberhalb der Messgenauigkeit von 10^6 lag. Das experimentell mögliche Ergebnis ist durch die schraffierte Fläche dargestellt. Das COCOSYS-Resultat liegt innerhalb dieses Bereichs, während ASTEC zwei Größenordnungen unterhalb der Nachweisgrenze des Versuchs liegt. Weitere Rechnungen haben gezeigt, dass dieser Unterschied durch die in COCOSYS automatisch durchgeführte Kalibrierung entsteht. COCOSYS-Rechnungen mit ausgeschalteter Kalibrierung zeigen ähnliche Werte wie ASTEC.

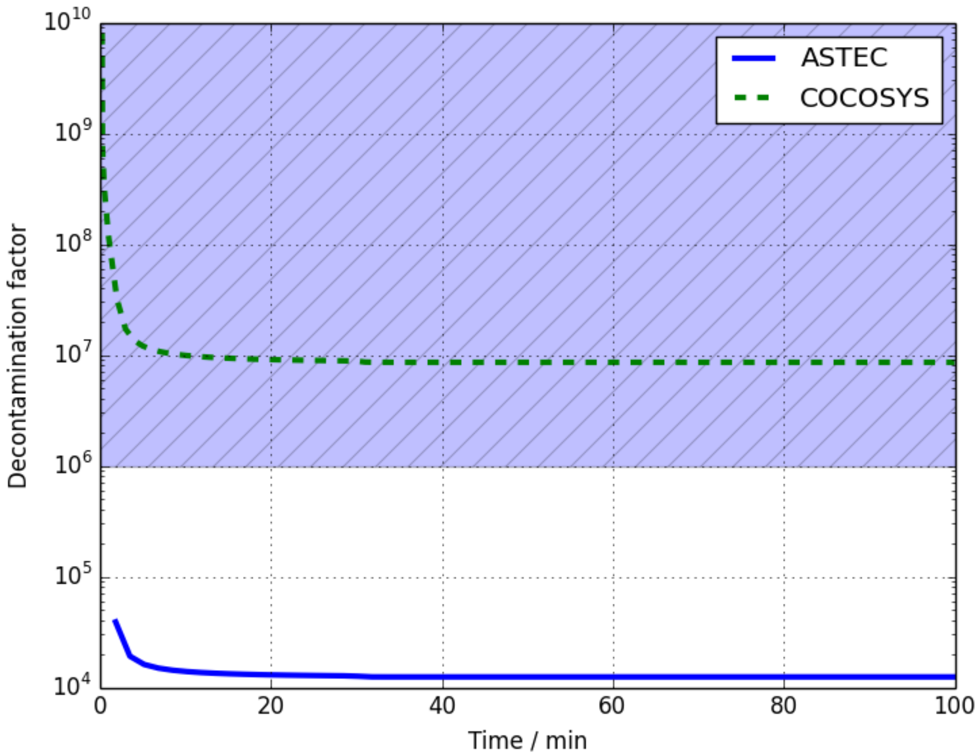


Abb. 4.23 Berechneter Dekontaminationsfaktor mit COCOSYS und ASTEC

Die durchgeführten Arbeiten zeigen, dass die Modellerweiterungen im neuen MMFVF-Modell in COCOSYS zu einer realistischeren Beschreibung des Druckabbauverhaltens in Ventingstrecken führen. Insbesondere ermöglicht das Aerosolablagerungsmodell in COCOSYS eine Rückwirkung auf die thermodynamischen Ergebnisse. Die automatische Kalibrierung in COCOSYS ermöglicht wesentlich bessere Experimentnachrechnungen in COCOSYS, falls Kalibrierungsversuche für einen benutzten Filter vorhanden sind. Die Jodabscheidung in Sorptionsfiltern ist nicht untersucht worden. Insbesondere für eine realistische Berechnung der ACE-Versuche ist es nötig, eine Kalibrierung durchzuführen. Diese kann derzeit in ASTEC nicht automatisch vor Beginn der eigentlichen Rechnung vom Code durchgeführt werden und muss daher per Hand vorgenommen werden. Daher ist insbesondere die Übernahme der automatischen Filterkalibrierung aus COCOSYS in CPA sinnvoll.

4.3.3.3 Modellierung von NIS-Rekombinatoren

In Rekombinatoren (PAR) wird während eines Unfalls freigesetzter Wasserstoff an den Katalysatorblechen des PAR im Containment abgebaut. Als Katalysatormaterial wird Platin oder Palladium eingesetzt. Bereits im COCOSYS-Vorgängercode RALOC war

ein detailliertes Rekombinatormodell vorhanden, das auf der Annahme einer Arrhenius-typischen Reaktionskinetik im Bereich der katalytischen Platten beruhte. Erkenntnisse des Forschungszentrums Jülich (FZJ) belegen, dass die Reaktionskinetik innerhalb von Rekombinatoren nicht nach Arrhenius verläuft, sondern durch die Diffusion von Wasserstoff an die katalytischen Platten bestimmt wird. Die Reaktionskinetik des Rekombinatormodells in COCOSYS wurde daher im Projekt RS1185 von einem Arrhenius- auf einen Diffusionsansatz geändert /NOW 10/. Im Rahmen dieses Projektes ist dieses Modell von COCOSYS nach ASTEC/CPA transferiert worden wie in Abschnitt 3.4 bzw. in der ASTEC-Dokumentation /NOW 13 für V2.0, NOW 14 für V2.1/ erläutert wird. Neben den plattenförmigen Rekombinatoren, wie sie von AECL und AREVA angeboten werden, existieren aber noch Partikellbett-Rekombinatoren, die von der Firma NIS Ingenieurtechnik produziert werden.

Innerhalb der OECD THAI HR-Versuchsreihe /OECD10/ sind drei Experimente (HR-14, HR-15 und HR-16) mit NIS-Rekombinatoren durchgeführt worden /KAN 09/. Der experimentelle Aufbau des THAI-Behälters in diesen Versuchen ist in Abb. 4.24 dargestellt. Der untere innere Zylinder ist die einzige Komponente, die in den THAI-Behälter eingebaut ist. Der Rekombinator wird an die Außenseite dieses Zylinders montiert. Unterhalb des Zylinders liegt die kreisförmige Einspeiseleitung mit vertikal nach oben gerichteten Bohrlöchern, über die Wasserstoff in die Versuchsanlage eingespeist wird. In einem typischen HR-Experiment werden zwei aufeinander folgende Einspeisephasen durchgeführt. Jede Einspeisephase startet mit einer langsamen Einspeisung, bis der Rekombinator anfängt zu arbeiten. Danach wird die Wasserstoffzufuhr erhöht. Zu einem festgelegten Zeitpunkt wird die Zufuhr eingestellt und die Rekombination wird in der so genannten Wasserstoffabbauphase weiter beobachtet, bis die Rekombination stoppt. Danach wird eine zweite Einspeisephase unter geänderten Randbedingungen gestartet, wie z. B. mit niedriger Sauerstoffkonzentration, die zu Bedingungen mit Sauerstoffmangel führen, bei der die Reaktion nicht durch den vorhandenen Wassersoff sondern durch den vorhandenen Sauerstoff begrenzt wird. In anderen Experimenten ist absichtlich eine Verbrennung herbeigeführt worden, die durch die starke Rekombination direkt am Rekombinator ausgelöst wird.

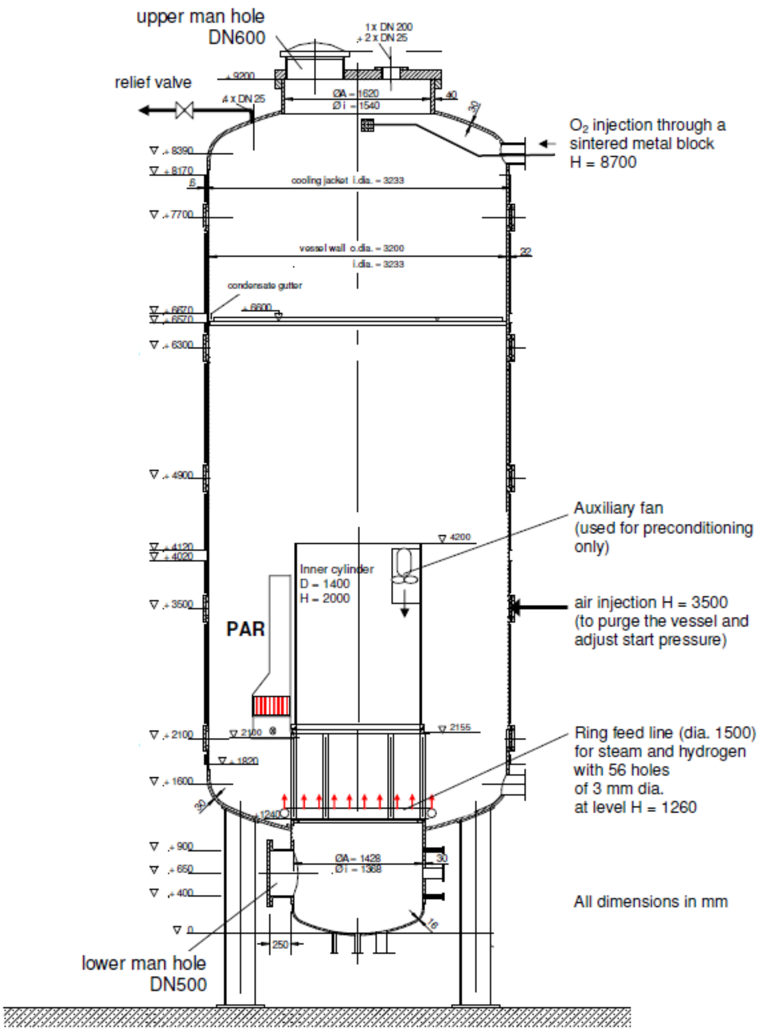


Abb. 4.24 Experimenteller Aufbau der THAI HR-Experimente aus /KAN 09/

Alle drei NIS-Tests sind mit 1,5 bar, 74 °C und einem volumetrischen Anteil von 25 Vol.-% Wasserdampf durchgeführt worden. Der Sättigungsdampfdruck bei 74 °C beträgt etwa 0,370 bar und ist damit nahe bei 1,5 / 4 = 0,375 bar. Damit sind die Experimente unter etwa 100 % gesättigten Bedingungen durchgeführt worden. Darüber hinaus sind im OECD-THAI2-Projekt drei Versuche (HR-40, HR-41 und HR-42) mit demselben Aufbau durchgeführt worden, die allerdings andere Drücke bzw. Temperaturen aufweisen:

– HR-40: 1,5 bar – 117 °C

– HR-41: 2,0 bar – 105 °C

– HR-42: 3,0 bar – 117 °C

Der schematische Aufbau beider Arten von Rekombinatortypen ist in Abb. 4.25 dargestellt. Im Gegensatz zu den schmalen, mit einem Katalysator beschichteten Folien von weniger als 1 mm Dicke ist in den Partikelbett-Rekombinatoren eine Anzahl von vertikal angeordneten Kassetten eingebaut. Die Kassetten sind gefüllt mit palladiumbeschichteten Al_2O_3-Kügelchen. Das Modell beruht auf der Annahme, dass sich die Platten aufgrund der Katalyse erhitzen und einen Auftrieb durch das Rekombinatorgehäuse erzeugen. Der Wasserstoff gelangt durch Diffusion an die heißen Platten, wo er vollständig mit dem vorhandenen Sauerstoff zu Wasserdampf reagiert. Die Strömungspfade im Partikelbett-Rekombinator unterscheiden sich davon etwas: Das wasserstoffhaltige Gas kann durch den Volumenstrom von unten in die Kassetten einströmen und wird durch diese durchgeleitet, wobei sich im Partikelbett eine sehr viel größere Kontaktfläche zwischen Gas und Katalysator ausbilden kann, als bei einem plattenförmigen Rekombinator. Außerdem ist ein Eindiffundieren von der Seite ähnlich wie beim Plattendesign möglich. Dabei sind die Dichte und Masse des Materials in den Kassetten sowie Wärmekapazität, Wärmeleitfähigkeit und Strahlungsvermögen der Kassetten unbekannt.

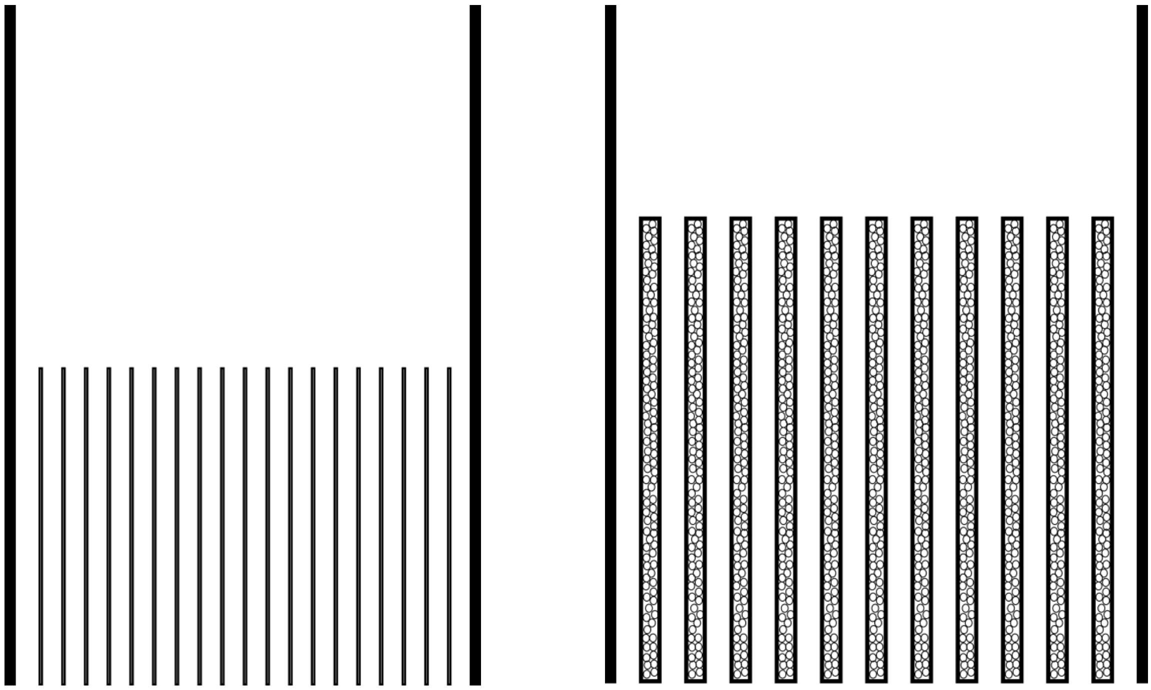


Abb. 4.25 Schematischer Vergleich von plattenförmigen (z. B. AREVA) und Partikelbett-Rekombinatoren (NIS)

Im Rahmen von CESAM ist untersucht worden, inwieweit eine Simulation der NIS-Rekombinatoren mit Hilfe des detaillierten Modells für plattenförmige Rekombinatoren

möglich ist. Dazu sind die OECD-THAI-HR-Versuche mit NIS-Rekombinatoren ausgewertet worden. Für diese Analysen sind Annahmen für die Materialeigenschaften der Kassetten getroffen worden. Diese sind nach Anpassung der Temperatur- und Strömungsgeschwindigkeiten an die Experimente wie folgt gewählt worden:

- CP = 5 J/kg/K
- DL = 19,1 W/m/K
- RHO = 7800 kg/m³
- EMI = 1

Vom Modell wird aufgrund der unterstellten Geometrie nur die seitliche Diffusion an die Kassetten betrachtet. Der Volumenstrom, der von unten in die Kassetten eintritt, wird modellbedingt nicht berücksichtigt. Die dargestellten Rechnungen sind nicht mit ASTEC durchgeführt worden, sondern die thermodynamischen Randbedingungen aus dem Experiment sind mit Tabellenwerten direkt an das Rekombinator-Modell übergeben worden. Die Arbeit geht als Fallstudie des Codeentwicklers GRS (und nicht im eigentlichen Sinn einer Validierung von ASTEC) in den CESAM Bericht D20.24 „Synthesis of validation of ASTEC V2.1rev0 and rev1 versions“ zur Validierung von ASTEC V2.0rev3 ein.

4.3.3.3.1 NIS-Korrelation von NUBIKI

Des Weiteren ist vom ungarischen CESAM-Partner NUBIKI eine korrelative Beschreibung für NIS-Rekombinatoren vorgeschlagen worden. Diese ist in Gleichung 4.3 dargestellt:

$$\dot{r}_{H_2} = C_{H_2}^{X1} \frac{p}{T} (CASNR)(CHIMNEY) A * f(\Delta t) \qquad (4.3)$$

Die Gleichung liefert die Rekombinationsrate für Wasserstoff $\dot{r}_{H_2}$ in kg/h:

$\dot{r}_{H_2}$ Rekombinationsrate Wasserstoff [kg/h]

Die Eingabegrößen sind in folgender Liste aufgeführt:

C_{H_2} Molbruch Wasserstoff (-)

P Druck (bar)

T	Temperatur (K)
CASNR	Anzahl Kassetten (-)
CHIMNEY	Konstante für den Kamineffekt (-)
X1	Exponentenkoeffizient des Rekombinators (-)
A	Zweiter Koeffizient des Rekombinators (-); Konstanter Wert = 724.

Darüber hinaus gibt es einen zeitabhängigen Term, der in der Funktion $f(\Delta t)$ enthalten ist:

$$f(\Delta t) = 1 - e^{\left(-\frac{\Delta t}{T_0}\right)} \qquad (4.4)$$

Mit folgender Bedeutung der Variablen:

Δt	Aktuelle Zeit minus Zeitpunkt des Rekombinatorstarts (s)
T_0	Charakteristische Zeit für die Simulation der Zeitabhängigkeit (s)

Zu Beginn des Rekombinationsprozesses ist $f(\Delta t)$ sehr klein, wodurch ein langsames Anfahren der Rekombinatorleistung simuliert wird, wie sie von den Experimentatoren beschrieben wird. Mit Zunehmender Zeitdauer vom Rekombinatorstart nähert sich der Term dem Wert 1 an. Als charakteristische Zeitlänge wird die Variable T_0 übergeben. Zum Zeitpunkt $\Delta t = T_0$ beträgt der Korrekturfaktor somit $1 - {}^{1}/_{e} \approx 0{,}63$, also etwa 63 %.

Bei höheren Abbauraten ist eine zusätzliche Rekombination außerhalb des Rekombinators aufgetreten, die sich direkt als Auswurf von glühenden Partikeln aus dem Rekombinator in die umgebende Atmosphäre beobachten ließ (so genannter „Glow Worm"-Effekt). Diese zusätzliche Bulk-Rekombination wird durch die Korrelation in Gleichung 4.5 wiedergegeben, deren Wert zu der Standard Korrelation addiert wird, falls der Wasserstoffanteil größer ist als ein vorgegebener Schwellwert ‚CLS'.

$$\dot{\mathrm{r}}_{\mathrm{bulk}} = \frac{\left(\mathrm{C}_{\mathrm{H}_2} - \mathrm{CLS}\right)^{\mathrm{X2}}}{\mathrm{K2}} \qquad (4.5)$$

Mit der Bulk-Rekombinationsrate für Wasserstoff in kg/h

$\dot{r}_{bulk}$ Rekombinationsrate Wasserstoff (kg/h)

Die Bedeutung der unabhängigen Variablen ist in folgender Liste definiert:

CLS Schwellwert Konzentration für Bulk-Rekombination. Oberhalb dieses Wertes wird die Korrelation für Bulk-Rekombination zur Standard-Korrelation addiert.

X2 Exponent zur Bestimmung der Bulk-Rekombination

K2 Koeffizient zur Bestimmung der Bulk-Rekombination

Diese Korrelation ist von der GRS im Rahmen des CESAM-Arbeitspunktes WP30 in die ASTEC-Version V2.1beta eingebaut worden und wird in CESAM von NUBIKI untersucht. Damit gewährleistet das CESAM-Projekt einen aktiven Austausch internationaler Experten. Im Rahmen des Projekts RS1508 ist die Korrelation auch in COCOSYS übernommen worden.

Von NUBIKI sind bestimmte Parameter für die Simulation des in den THAI Versuchen benutzten Rekombinators vorgeschlagen worden. Bei den unten vorgestellten Ergebnissen sind folgende Werte für die Korrelation benutzt worden:

- CASNR = 11
- CHIMNEY = 1,35
- X1 = 1,307
- T_0 = 1 s
- CLS = 8 Vol.-%
- X2 = 1,307
- K2 = 0,01

Anders als von NUBIKI vorgeschlagen ist die charakteristische Zeit auf 1 s gesetzt worden. Damit wird ein sehr schnelles Anfahren des Rekombinators simuliert und der Abbauprozess beginnt ohne große Verzögerung. Eine Sekunde nach Rekombinationsstart werden bereits 63 % der Rekombinationsleistung erreicht, da $f(1) = 1 - \mathrm{e}^{-1} \approx$

0,63. CLS ist auf 8 Vol.-% gesetzt worden, die in keinem THAI-Versuch erreicht werden. Damit tritt in der Simulation keine Bulk-Rekombination auf.

4.3.3.3.2 Ergebnisse mit Rekombinatormodell und Korrelation

Vergleiche der Ergebnisse zwischen der korrelativen Beschreibung und dem Detailmodell für die Versuche HR-14, -15 und -16 sind in den Grafiken Abb. 4.26 – Abb. 4.28 dargestellt. In Abb. 4.26 ist oben die Wasserstoffkonzentration in Vol.-% und unten die Rekombinationsrate in g/s im Versuch HR-14 über der Zeit aufgetragen. Während der ersten Einspeisephase wird der Startzeitpunkt der Rekombination vom Modell und der Korrelation getroffen. Die Rekombinationsrate des Modells zeigt eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment, solange die Wasserstoffkonzentration nicht zu hoch und die Rekombination nicht zu stark wird. Während der starken Rekombinationsphase wird der Wasserstoffabbau vom Modell unterschätzt. Ab etwa einem Wert von 4 Vol.-% tritt eine Abweichung zum experimentellen Wert auf. Im Experiment ist während dieser Phase mit stark arbeitender Katalyse das Austreten von glühenden Partikeln aus dem Rekombinator beobachtet worden, was die Annahme einer zusätzlichen Bulk-Rekombination rechtfertigt, die außerhalb des Bereichs der Kassetten auftritt. Die schraffierte Fläche zeigt den Zeitraum, in dem glühende Partikel aus dem Rekombinator ausgetreten sind, also den Zeitraum, zu dem eine erhöhte Bulk-Rekombination zu erwarten ist. Nach dem Anhalten der Wasserstoffzufuhr nimmt die Wasserstoffkonzentration in der Abbauphase ab und die Rekombinationsrate wird wieder vom Modell übereinstimmend mit dem Experiment berechnet. Auch zu Beginn der zweiten Einspeisephase ist das Modell wieder in Übereinstimmung mit den Messungen, solange die Rekombination nicht zu stark wird. Während das Modell die Rekombinationsrate bei starker Abbauleistung unterschätzt, zeigt die Korrelation eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten während der gesamten Versuchsphase.

Dieselbe Auftragung für Versuch HR-15 ist in Abb. 4.27 dargestellt. Während dieses Versuchs sind zwei Phasen mit glühenden Partikeln beobachtet worden. Während das Detailmodell diese Phasen mit starker Rekombination – wie auch in HR-14 – unterschätzt, zeigt die Korrelation zu diesen Zeitpunkten eine Überschätzung der Rekombinationsrate.

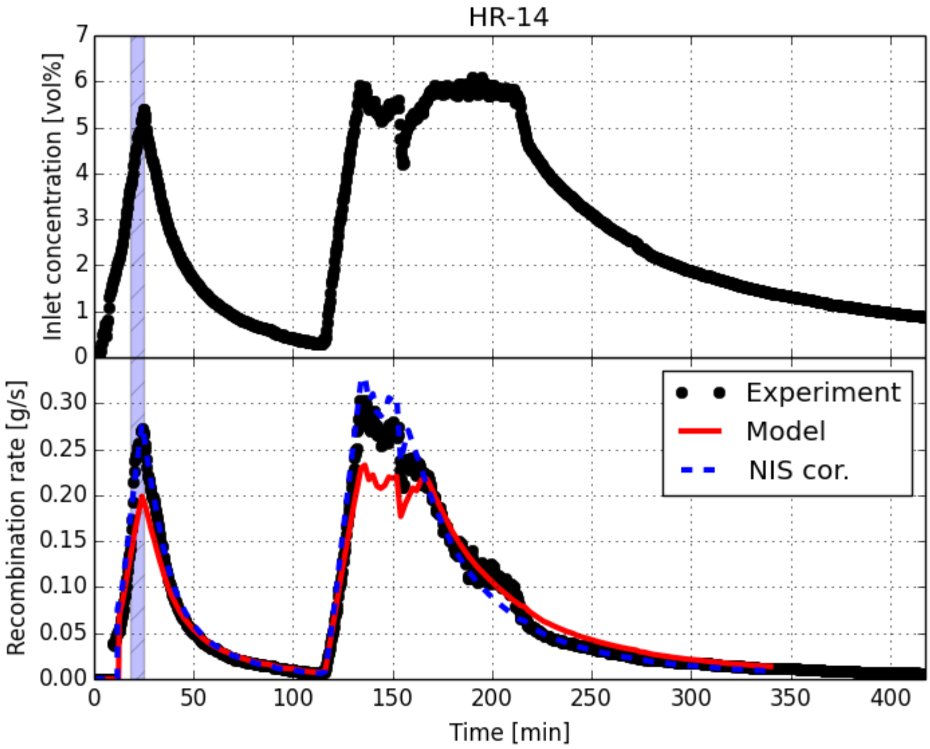


Abb. 4.26 Wasserstoffkonzentration und Rekombinationsrate in HR-14

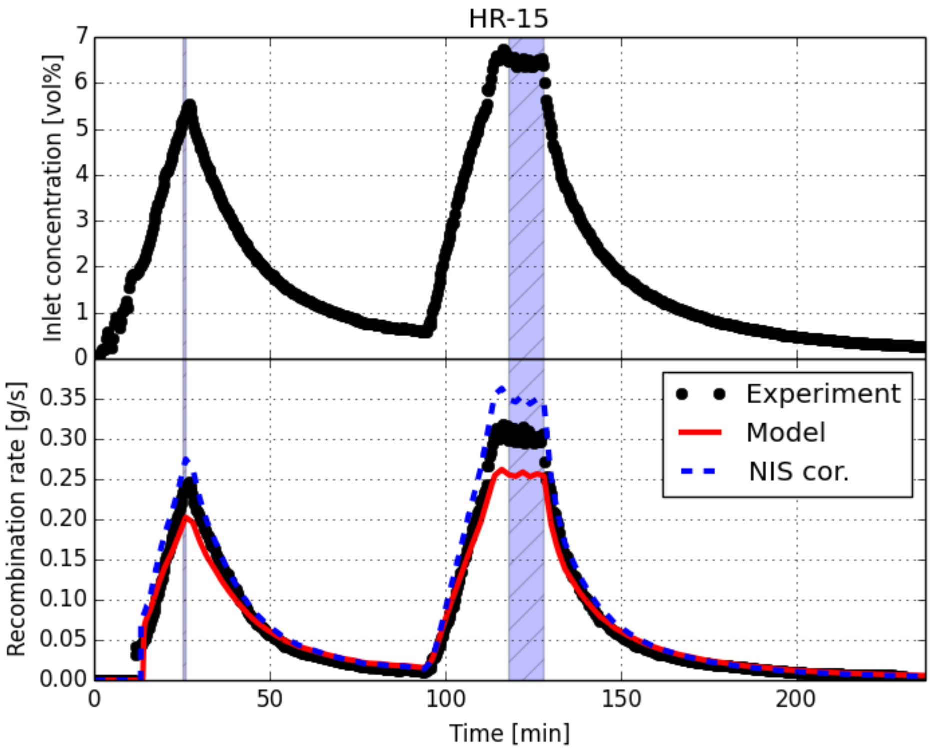


Abb. 4.27 Wasserstoffkonzentration und Rekombinationsrate in HR-15

Die Auftragung für HR-16 ist in Abb. 4.28 dargestellt. Ziel dieses Versuchs war es, eine Deflagration durch den Rekombinator auszulösen. Diese verlief allerdings wesentlich milder als vorhergesagt. Ab dem Zeitpunkt ~23 min, dem Zeitpunkt mit der höchsten Wasserstoffkonzentration, ist eine lokale Temperaturzunahme und ein kleiner Druck-Peak gemessen worden, was auf eine leichte Verbrennung hindeutet. In diesem Experiment wird das Einsetzen der Rekombination sowohl von der Korrelation als auch vom Modell zu früh berechnet. Während der starken Rekombinationsphase wird die Abbauleistung wieder vom Modell unter- und von der Korrelation überschätzt.

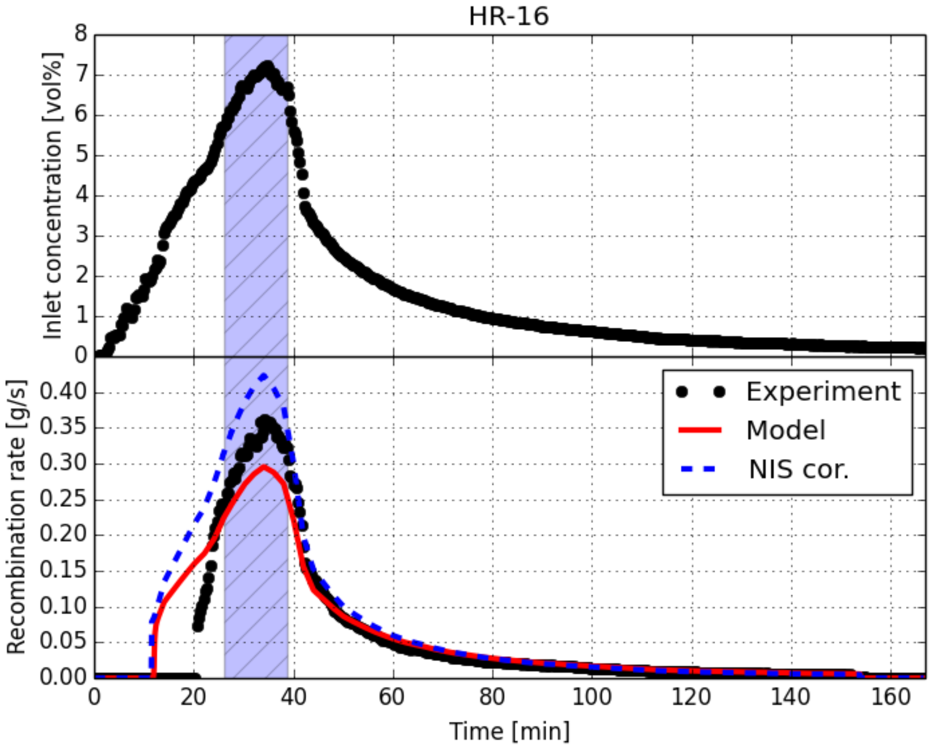


Abb. 4.28 Wasserstoffkonzentration und Rekombinationsrate in HR-16

Zusammenfassend wird deutlich, dass mit dem Detailmodell gute Ergebnisse erzielt werden, solange die Wasserstoffkonzentration und somit die Rekombinationsrate niedrig genug ist. Für Phasen mit einer stärkeren Rekombination wird die Abbaurate von Wasserstoff unterschätzt. Während dieser Phasen mit sehr stark arbeitendem Rekombinator sind im Experiment glühende Partikel beobachtet worden, die mit dem Volumenstrom aus dem Rekombinator ausgetreten sind. Die Vermutung der Experimentatoren ist, dass bei höheren Volumenströmen katalytisches Material in der Strömung mitgerissen wird. Das würde dazu führen, dass zusätzlicher Wasserstoff außerhalb der Kassetten rekombiniert wird, was nicht vom Modell für Plattenrekombinatoren berück-

sichtigt wird. Die höheren gemessenen Abbauraten während dieser Phasen unterstützen die von den Experimentatoren aufgestellte These einer zusätzlichen Bulk-Rekombination auf der Ausströmseite des Rekombinators. Der alternative korrelative Ansatz zur Simulation von NIS-Rekombinatoren, der von NUBIKI vorgeschlagen worden ist, enthält auch einen Anteil für diese Bulk-Rekombination oberhalb einer bestimmten Wasserstoffkonzentration. Die Korrelation liefert allerdings eine gute Nachrechnung der Experimente auch ohne diesen zusätzlichen Term zur Bulk-Rekombination.

Darüber hinaus sind Rechnungen zu den Versuchen HR-40, -41 und -42 im OECD THAI2 Projekt durchgeführt worden, deren Ergebnisse hier nicht dargestellt werden, da die Daten noch nicht öffentlich zugänglich sind. Diese Experimente zeigen, dass die Korrelation für höhere Drücke die Rekombinationsrate überschätzt, das Detailmodell aber auch für höhere Drücke sehr gute Ergebnisse liefert. Vom Modell wird also der Übergang zu höheren Drücken richtig wiedergegeben, wohingegen die Beschreibung in Abhängigkeit der Volumenkonzentration, wie sie in der Korrelation gegeben ist, die Dichteänderung bei höheren Drücken nicht wiederspiegelt. Alternativ wäre die Korrelation auf molare Dichten mit der Einheit mol/m³ umzustellen. Die hier vorgestellten Ergebnisse werden auf dem OECD-THAI2-Abschlussseminar am 18./19. September 2014 in Frankfurt vorgestellt.

4.3.3.4 Bewertung des Modellstandes von MEDICIS

In diesem Arbeitspunkt wurde der Modellstand von ASTEC/MEDICIS als Simulationswerkzeug zu MCCI kritisch betrachtet. Die daraus abgeleiteten Beiträge flossen in die unter Abschnitt 4.3.3 genannten CESAM-Berichte D20.21 /NOW 13b/ zu geeigneten/benötigten Validierungsexperimenten und D20.22 /HER 14/ zu benötigten Modellentwicklungen für MEDICIS ein.

Zum Status der vorhandenen Modelle in MEDICIS wurden folgende Themen betrachtet:

- 2D-MCCI (Intensität der Betonzerstörung in axialer und seitlicher Richtung)
- Präsenz von Oxid- und Metallschmelze
- Einfluss der Armierung im Beton

– Neue Anlagendesigns der Generation III+

– Spaltprodukt- und Aerosolfreisetzung aus der Schmelze

Nachfolgend werden der Modellstand in MEDICIS und der weitere Entwicklungsbedarf zu diesen Einzelpunkten aus Sicht der GRS zusammengefasst. Für die im Nachfolgeprojekt zu RS1508 geplanten Entwicklungsarbeiten zu COCOSYS/MEDICIS ist dies entsprechend berücksichtigt worden.

2D-MCCI

Hier bestehen noch Unsicherheiten in der Extrapolation auf Reaktoranwendungen, da die mechanistische Ursache für die in verschiedenen Experimenten beobachteten Unterschiede in der Richtungspräferenz der Erosionsintensität noch nicht eindeutig geklärt ist. Die für die Erosion ursächlichen Wärmeströme werden durch Strukturen an der Schnittstelle zwischen Schmelze und Beton erklärt, für die bei unterschiedlichen Betonsorten ein unterschiedliches Verhalten unterstellt wird. Da ein mechanistisches Verständnis dieser Strukturen noch offen ist, wird deren Einfluss durch effektive Werte des Wärmeübergangskoeffizienten für den Gesamtwärmeübergang zwischen Schmelze und Beton beschrieben. Unterschiedlichen Betonen wird aus diesen Gründen in der Vereinfachung ein unterschiedlicher Satz von Wärmeübergangskoeffizienten (axial/radial) zugeordnet, wobei z. B. in Bezug auf den Einfluss der Betonzusammensetzung nicht klar ist, bei welcher Betonzusammensetzung das Verhalten von z. B. silikatischem Beton in ein für einen kalkstoffreichen Beton typisches Verhalten übergeht.

Die Übertragung der vorhandenen Erkenntnisse aus Experimenten im Labormaßstab (typische Durchmesser der Reaktorgrube: ca. 50 cm; typische eingesetzte Schmelzemasse: < 1 000 kg) auf den Reaktormaßstab (Durchmesser Reaktorgrube ca. 6 m, Schmelzemasse: ~ 100 000 kg) wurde in einer gemeinschaftlichen Arbeit von GRS, AREVA, KIT, Ruhruniversität Bochum und IRSN betrachtet /SPE 14/. Dort konnte für den Fall einer homogenen, oxidischen Schmelze bestätigt werden, dass sich das langzeitige Verhalten von MEDICIS – auf die Reaktorsituation angewandt – in guter Übereinstimmung zu generalisierten analytischen Ansätzen befindet. Durch diese Konsistenz erhält MEDICIS eine zusätzliche Validierung.

In der Arbeit wurde festgestellt, dass MEDICIS nach einiger Zeit von MCCI (~ 1 h) in eine quasi-stationäre Abfolge von Zuständen hineinläuft, bei der die intern freigesetzte Nachwärmeleistung nahezu vollständig in Wärmeverluste in den Beton oder Abstrahlungswärme umgesetzt wird. Bis zum Erreichen dieser quasi-stationären Zustandsab-

folge wird die Schmelze entweder aufgeheizt oder abgekühlt und dies nimmt einen gewissen Zeitraum ein, mit der Konsequenz, dass kurz laufende Experimente mit Oxidschmelzen mit Zeitdauern < ~ 1 h vermutlich ausschließlich in einem solchen transienten Zeitbereich liegen. Dies stellt für die Validierung von kurz laufenden Experimenten sehr hohe Anforderungen an den Code, da die transiente Phase der Entspeicherung bzw. Einspeicherung von Wärme in bzw. aus der Schmelze stark von der korrekten Prognose von Stoffwerten wie Dichte, Wärmekapazität, Latentwärme etc. abhängt. In der langfristigen, quasi-stationären Zustandsfolge jedoch wird das Niveau der Schmelzetemperatur nicht so sehr von einzelnen Stoffdaten, sondern maßgeblich von der Effizienz der Wärmeübergänge sowie von Randbedingungen an der Oberfläche der Schmelze beeinflusst, wofür empirische Daten vorliegen. Im Vergleich der in /SPE 14/ angewandten Methoden auf die Reaktorsituation differierten die Ergebnisse für die Schmelzetemperatur für den betrachteten Reaktorfall um nur ca. 100 K nach einem vergleichsweise langen Zeitraum von 6 Tagen an MCCI (Abb. 4.29).

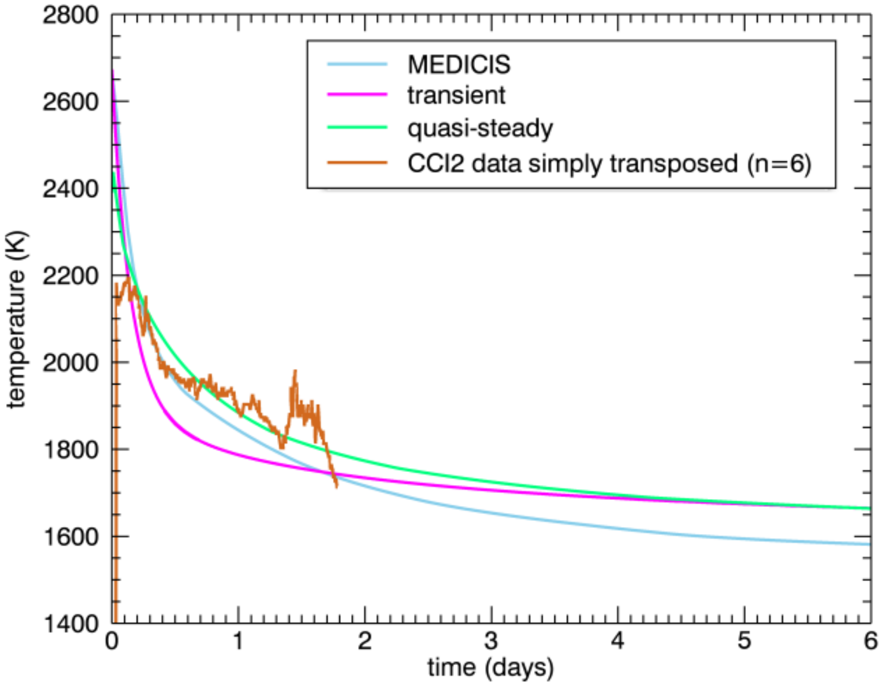


Abb. 4.29 Mit MEDICIS sowie vereinfachten analytischen Ansätzen für die Lösung der Energiegleichung in veränderlicher Geometrie prognostizierte Schmelzetemperaturen in einer generischen Reaktoranwendung /SPE 14/

Für eine verbesserte, mechanistische Absicherung der nach heutigem State-of-the-Art empirisch angesetzten Wärmeübergangszahlen ist ein genaueres Verständnis der

Vorgänge an der Schnittstelle Schmelze/Beton sowie auch eine genaue Bilanzierung der Strahlungswärmeverluste in den Experimenten nötig. Verbesserte Modellbeschreibungen zum Komplex 2D-MCCI sind auf Basis der heutigen Datenlage nicht absehbar.

Einfluss der Metallschmelze

In MCCI-Situationen, bei denen sowohl metallische Schmelze (Zr, Fe, ...) als auch oxidische Schmelze im Pool vorhanden ist, ist die Charakterisierung einer wahrscheinlichen Konfiguration unsicher. Die Tatsache, dass Metalle und Oxide nicht mischbar sind und sich relativ deutlich in der Dichte unterscheiden, legt eine geschichtete Konfiguration nahe (z. B. Metall unten, leichtere Oxidmischschmelze oben). Eine solche Annahme findet zwar oft in Simulationen Anwendung, ist aber noch nicht zweifelsfrei in Experimenten beobachtet worden. Experimente in der französischen VULCANO-Anlage bei CEA lassen auf kompliziertere Mischungszustände als in den Extremen (d. h. entweder völlig vermischt oder geschichtet) vermuten. Dies betrifft auch die Oxidation der Metallschmelze: VULCANO-Experimente deuten darauf hin, dass für die Oxidation des Eisens mehr Sauerstoff an die metallische Schmelze herangeführt wird, als durch die Betonerosion in den Pool eingetragen wird. Existierende Ansätze von Kriterien für eine totale Entmischung bzw. totale Vermischung der Teilschmelzen sind daher als relativ unsicher zu bezeichnen.

In weitergehenden Arbeiten zu CESAM werden zurzeit die MOCKA-Versuche bei KIT mit Metall- und Oxidschmelzen mit MEDICIS analysiert. Es zeichnet sich ab, dass für die realitätsnahe Simulation der inneren Leistungsfreisetzung in MOCKA Annahmen über den Ort der Materialeinspeisung (in den MOCKA-Versuchen wird portionsweise und mit Pausen Zr und Thermit in die Oxidschmelze eingebracht, die dort exotherm reagieren) sowie Annahmen über den Transport von Spezies zwischen den Schichten eine große Rolle spielen. Die Validierung von MEDICIS anhand der MOCKA-Versuche ist zurzeit in Arbeit und wird später in CESAM eingebracht werden.

Zur verbesserten Modellierung ist dringend ein verbessertes Verständnis der Phänomenologie nötig, was aber zurzeit an experimentelle Machbarkeitsgrenzen stößt.

Einfluss der Armierung im Beton

Der Einfluss von Armierung auf MCCI wird in der MOCKA-Versuchsreihe bei KIT untersucht. Es zeigt sich eine komplexe Datenlage:

- In allen MCCI-Versuchsreihen bei KIT mit Eisen und Thermitschmelzen auf Al_2O_3-Basis **ohne Armierung** im **silikatischen** Beton (BETA, COMET, MOCKA) hat sich stets eine starke **axiale Präferenz** der Betonerosion ausgebildet.
- Wenn aber der **silikatische Beton** in den MOCKA-Versuchen **Armierung enthält**, zeigen die Ergebnisse eine nahezu **gleichförmige Erosion** am Boden und an der Seitenwand (Abb. 4.30 links).
- Bei Versuchen mit **LCS-Beton (mit oder ohne Armierung)** wird dagegen eine relativ **schwache Erosion am Boden** beobachtet im Vergleich zur stärkeren Erosion an den Seitenwänden (Abb. 4.30 rechts).

Die Vorgänge sind mechanistisch bislang nicht verstanden und widersprechen teilweise den Beobachtungen mit Oxidschmelzen bei Nachwärmesimulation durch Strom oder Induktion. Auch hier wird dringend ein besseres Verständnis benötigt, zurzeit gelangt man aber an die Grenzen der experimentellen Machbarkeit.



Abb. 4.30 Gleichförmige Erosion in Versuchen mit silikatischem Beton und Bewehrung (linke Seite, MOCKA 3.1, /FOI 13/) und schwache Erosion am Boden mit LCS-Beton (rechte Seite, MOCKA 6.2, /FOI 14/)

Neue Anlagendesigns der Generation III+

Die Sicherheitskonzepte von neuen Anlagen der Gen. III+, die zurzeit in Planung oder im Bau sind, beruhen entweder auf Vorrichtungen zur Kühlung des RDB (external vessel cooling, in-vessel retention) oder auf einem Kernfängerkonzept, um einen Kernschmelzunfall zu stabilisieren und zu kontrollieren. Mit Blick auf diese Systeme sollten entsprechende generische Funktionalitäten in ASTEC bzw. MEDICIS vorhanden sein, um durchgängige Analysen für die Vorgänge im Containment zu ermöglichen.

Die in ASTEC speziell für den EPR entwickelte Kernfängermodellierung sollte auf mögliche Adaptionen für andere Kernfängertypen hin überprüft und gegebenenfalls erweitert werden.

Sofern ein Absturz von Schmelze in eine wassergefüllte Grube betrachtet werden muss (z. B. nach Versagen des RDB trotz Kühlungskonzept), werden die Phänomene der Fragmentierung von Schmelze/Schüttbettbildung und die Kühlung eines Schüttbettes unter Wasser bedeutsam. Hier ist zukünftig zu überlegen, wie geeignete Modelle für Systemcodes wie ASTEC, die auf Lumped-Parameter-Ansätzen beruhen, integriert werden können. An Modellen hierzu stehen z. B. die Modelle JEMI und MEWA von IKE Stuttgart bereit.

Was eine mögliche Kühlbarkeit von einer Coriumschmelze in enger Reaktorgrube durch Flutung von oben angeht, sind entsprechende Modelle in MEDICIS zwar verfügbar, aber die Verlässlichkeit dieser Modelle für die Anwendung auf Reaktormaßstab ist noch nicht zufriedenstellend und sollte erhöht werden, was aber durch die Grenzen der technischen Machbarkeit zurzeit nur sehr schwierig zu realisieren sein wird.

Spaltprodukt und Aerosolfreisetzung aus MEDICIS

Wenn ein spätes Versagen des Containments in Betracht gezogen wird, hat die Spaltproduktfreisetzung aus der Kernschmelze Einfluss auf den Quellterm. Darüber hinaus hat die Aerosolfreisetzung während des MCCI Einfluss auf die Aerosolkonzentrationen im Containment nach Versagen des RDB. In MEDICIS ist ein Spaltproduktfreisetzungsmodell durch VEIKI integriert worden /KOS 07/. In eigenen Überprüfungen dieses Modells durch die GRS zeigen sich in Abhängigkeit von der Zusammensetzung der Schmelze Unsicherheiten von ca. 1 bis zwei Größenordnungen bei der Prognose der frei gesetzten, relativen Massenanteile der Spaltprodukte.

Zu den Ursachen dieser Unsicherheiten tragen mehrere Dinge bei:

- Mögliche Fehler bei der Berechnung von Gleichgewichten in der Flüssigkeit, aus denen sich die Zusammensetzung ableitet
- Anwendbarkeit von Vereinfachungen im Modell (ideales Lösungsverhalten der Flüssigkeit für die Berechnung van Dampfdrücken, das Raoultsche Gesetz)
- Annäherung des nicht-idealen Lösungsverhaltens in der Flüssigkeit für die Berechnung der Gibbsschen Enthalpien in der Flüssigkeit
- generelle Unsicherheiten in der Berechnung Gibbsscher Enthalpien

Die Validierung von ASTEC/MEDICIS sollte zukünftig stärker auch die Modelle zur Spaltproduktfreisetzung einbeziehen. Die umfangreichste Datenbasis hierzu wird immer noch von den ACE-Experimenten (Advanced Containment Experiments) bei ANL bereitgestellt. Existierende Modelle zur Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze beruhen weitgehend auf der Berechnung von Gleichgewichtsdampfdrücken und weisen inhärente Unsicherheiten auf. Es sollte überlegt werden, ob nicht auch empirische, korrelative Ansätze erfolgversprechend sein können. Ferner sollte der mechanische Beitrag durch den Aufstieg und das Zerplatzen von Blasen auf die Aerosolproduktion durch ein Modell mit einbezogen werden. In Deutschland laufen zurzeit Untersuchungen bei der Ruhr-Universität Bochum und bei AREVA zur Validierung des Spaltproduktfreisetzungsmodells in MEDICIS anhand der ACE-Versuche.

4.3.4 OECD-Vorhaben BIP2 und STEM

4.3.4.1 OECD-STEM

Im Rahmen des OECD-STEM-Projekts werden von IRSN die AER-, LD- und START-Experimente durchgeführt. In den AER-Tests wird die Zersetzung der Iodaerosole aus CsI und IOx gemessen und in den LD-Tests (long duration) wird die Langzeitfreisetzung flüchtiger Iodspezies aus Farbcoupons untersucht. In den START-Tests (Study of the transport of ruthenium) werden die Bildung und der Transport von gas- und aerosolförmigen Ru-Spezies unter Primärkreis-Bedingungen gemessen.

In den meisten Iodmodellen inkl. AIM sind bislang die thermische und radiolytische Zersetzung von abgelagerten Iodaerosolen unberücksichtigt. In COCOSYS/AIM werden die Reaktionen nunmehr mit Hilfe der AER-Resultate ergänzt. Erste Ergebnisse dazu sind in Abschnitt 2.3.6 dokumentiert.

Ein wichtiges Resultat der LD-Tests betrifft den starken Einfluss der relativen Feuchte auf die Ablagerung und Wiederfreisetzung flüchtiger Iodspezies auf/von Farbe. Ein solcher Einfluss wurde auch in BIP-Tests (s. unten) und in THAI-Versuchen gemessen. Für die Erweiterung des Iod/Farbe-Modells für Gehopon-Farbe um den Einfluss der Feuchte wird derzeit in AIM ein semi-mechanistischer Ansatz geprüft (Abschnitt 2.3.4). Die Resultate der LD-Tests werden bei Eignung auch zur Modellentwicklung herangezogen. Je nach Hersteller zeigen die Dekontaminationsanstriche (Farben) ein unterschiedliches Verhalten gegenüber Iod. Daher sind für die Erweiterung von AIM nur Messungen an Farben mit Gehopon-ähnlichen Eigenschaften geeignet.

Die Ergebnisse der ST-Tests zum Transport und zum Verhalten von aerosol- und gasförmigem Ruthenium in einer Rohrleitung sind vor allem für Primärkreiscodes wie ATHLET-CD relevant. In COCOSYS-AIM ist der Einbau eines Ru-Modells für das Containment später vorgesehen. In STEM-2 sind Messungen zur Ablagerung und Rückhaltung von flüchtigem Ru geplant, die bei Eignung zur Validierung des neuen Modells in COCOSYS verwendet werden.

4.3.4.2 OECD-BIP2

Im Rahmen des „OECD Behaviour of Iodine Project 2“ (BIP-2) wurden von AECL Iod-Adsorptionstests in der Gas- und der Wasserphase, Bestrahlungstests an Farbe- und Polymeren sowie spezielle Untersuchungen an gealterter Ripolin-Farbe durchgeführt. Das Ziel der Messungen war, detaillierte und mechanistische Daten zur Iodablagerung auf Containment-Oberflächen und zur Organoiodbildung zu gewinnen. Diese sollen die Basis für eine detaillierte, verbesserte Modellierung der Reaktionen bilden.

In den Adsorptionstest wurde unter anderem die Abhängigkeit der Iod-Ablagerung von der Feuchte in der Gasphase untersucht. Diese Daten wurden für die Weiterentwicklung von AIM verwendet (vgl. Abschnitt 2.3.4).

Im Folgevorhaben BIP-3 ist eine gemeinsame analytische Bearbeitung der angefallenen Messwerte vorgesehen. Daran wird sich die GRS mit dem Ziel, das Iod/Farbe-Modell in AIM weiter zu verbessern, beteiligen.

4.3.5 Mitwirkung an ASTEC-TRG und -SC

Im Zeitraum des Vorhabens RS1508 fanden zwei Technical Review Meetings statt. Schwerpunktthema des TRG 40 war die Diskussion der spezifischen Modellanforderungen für die Simulation von Siedewasserreaktoren (SWR). Im TRG 41 war das Schwerpunktthema die zukünftige Kooperation zwischen IRSN und GRS zur ASTEC Entwicklung und die Diskussion zur gemeinsamen Codeentwicklungsstrategie.

4.4 Qualitätssicherung

4.4.1 Qualitätssicherung für COCOSYS und ASTEC

Die Anwendung der Programme COCOSYS und ASTEC sowohl durch GRS und IRSN als auch durch externe Anwender hat im Laufe dieses Projektes zu einer Reihe von Fragen zur Modellierung und zur Identifikation von Programmfehlern geführt (siehe auch Kapitel 4.2), die dringlich und zeitnah zu beantworten waren. Einige typische Beispiele für den Informationsrückfluss von externen Nutzern und den daraus eventuell resultierenden Programmänderungen sind in den folgenden Abschnitten beschrieben.

4.4.1.1 Stoffwerte im Kondensationsmodell

Von externen ASTEC/CPA Nutzern wurde angefragt, warum es Unterschiede in der verwendeten Referenztemperatur für die Stoffwertberechnung (spezifische Wärmekapazität, Wärmeleitfähigkeit und dynamische Viskosität der Grenzschicht) im Kondensationsmodell und im Sprühmodell von CPA gibt. Während im CPA-Sprühmodell die Referenztemperatur auf einer Mittelung im Verhältnis von 1/3 – 2/3 (Gas- bzw. Wassertemperatur) beruht, wird im Kondensationsmodell der 1/2 – 1/2 Ansatz verwendet. IRSN hat daraufhin alle relevanten Modelle zur Berechnung von Kondensation (Wandkondensation, Kondensation an der Wasseroberfläche in Nichtgleichgewichts- und DRASYS Zonenmodellen) auf den 1/3 – 2/3 Ansatz umgestellt.

Diese Änderung wurde seitens der GRS mit Hilfe des ASTEC/CPA-Regressionstestens sowie eines als besonders relevant eingeschätzten Versuches (THAI-Experiment TH9 mit kaltem Sumpfwasser) auf ihre Auswirkungen überprüft. Der Einfluss auf die berechneten Parameterverläufe ist sehr gering bzw. vernachlässigbar (siehe Abb. 4.31), sodass die als arithmetisches Mittel aus Gas- und Wassertemperatur berechnete Referenztemperatur in COCOSYS beibehalten wurde.

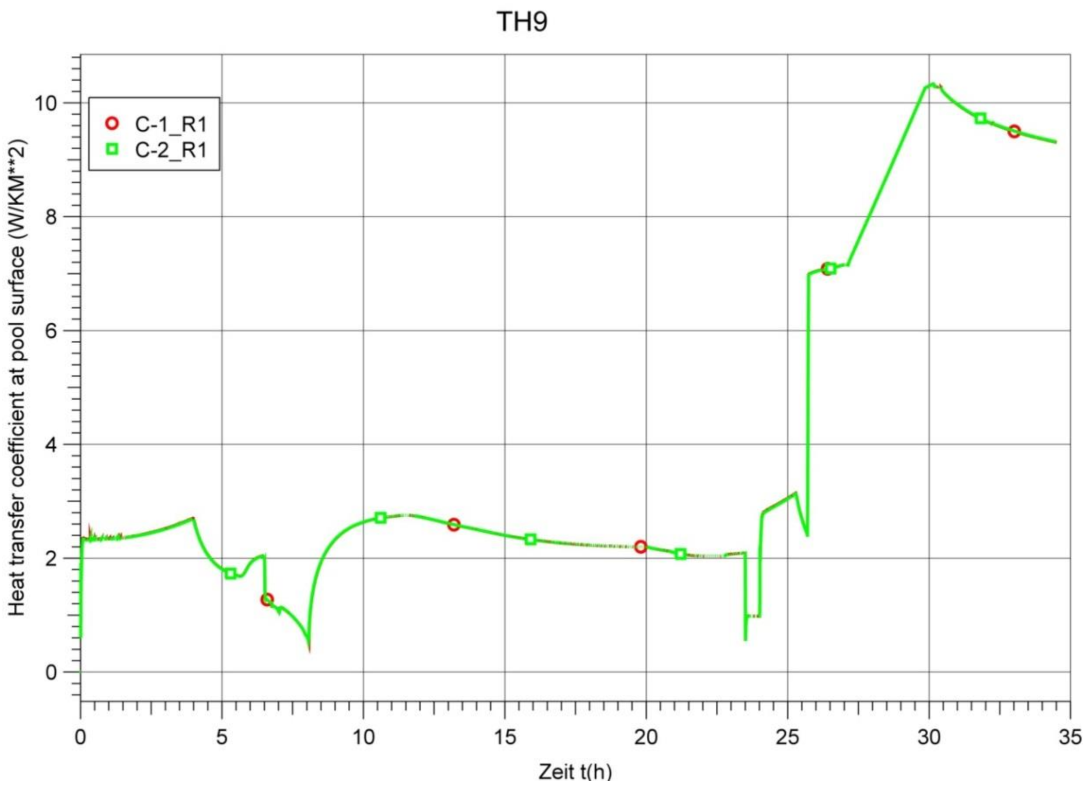


Abb. 4.31 ASTEC V2.0 – CPA, THAI-Experiment TH9, berechneter Wärmeübergang an der Sumpfoberfläche (Kondensation), Variante C-1: 1/2-1/2-Ansatz, Variante C-2: 1/3-2/3-Ansatz für die Referenztemperatur

4.4.1.2 Poolsieden

In einer ASTEC-Rechnung mit den gekoppelten Modulen CPA und MEDICIS stellte IRSN fest, dass es zu Instabilitäten im berechneten Massen- und Energieaustausch an der Wasseroberfläche bei siedenden Pools kam. Das Problem wurde daraufhin gemeinsam von IRSN und GRS an einem Testbeispiel mit vorgeheiztem Wasserpool plus Energieeinspeisung in den Sumpf bzw. in die darüber liegende Atmosphäre untersucht. Die festgestellte Instabilität im Verdampfungsmassenstrom beim Sieden (d. h. Pooltemperatur gleich oder über der Sättigungstemperatur) konnte sowohl in ASTEC/CPA

als auch in COCOSYS reproduziert werden (Abb. 4.32). Die Instabilitäten traten dabei verstärkt in CPA auf; die COCOSYS-Variante mit Energieeinspeisung in den Sumpf war nahezu stabil. Die von IRSN vorgeschlagene Programmkorrektur wurde als prinzipiell richtig bewertet und von CPA nach COCOSYS übertragen, wobei in COCOSYS aber immer noch kleinere Instabilitäten auftraten (Kurve "COC_DRASYS_SUMP_neu2_BK" in Abb. 4.33).

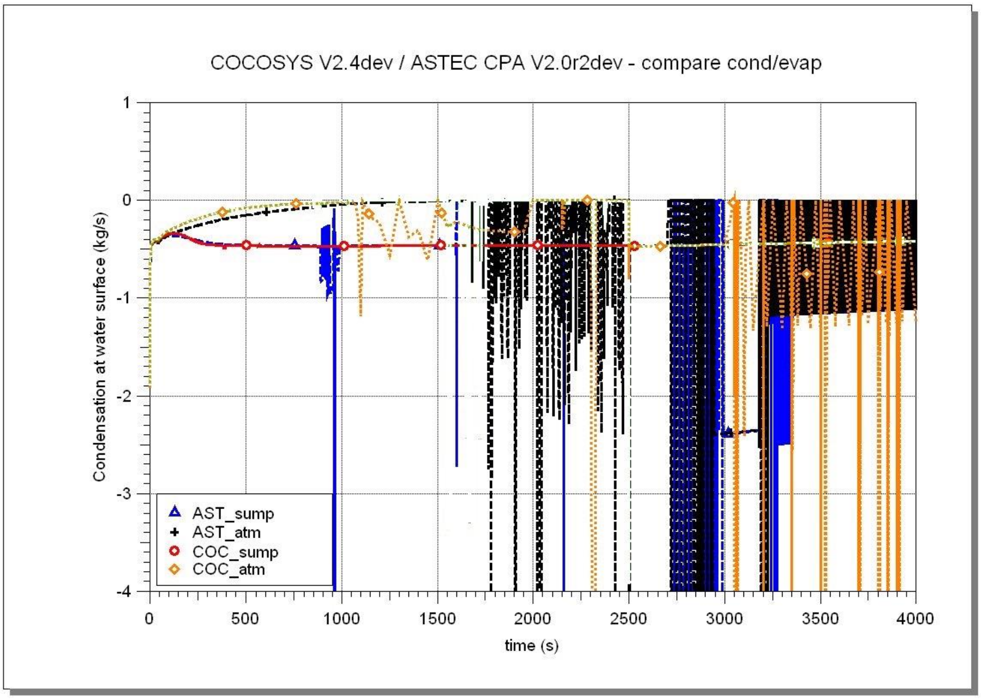


Abb. 4.32 COCOSYS-V2.4 und ASTEC-V2.0, Testbeispiel, Verdampfungsmassenstrom an der Sumpfoberfläche mit Energieeinspeisung in den Sumpf bzw. in die Atmosphäre

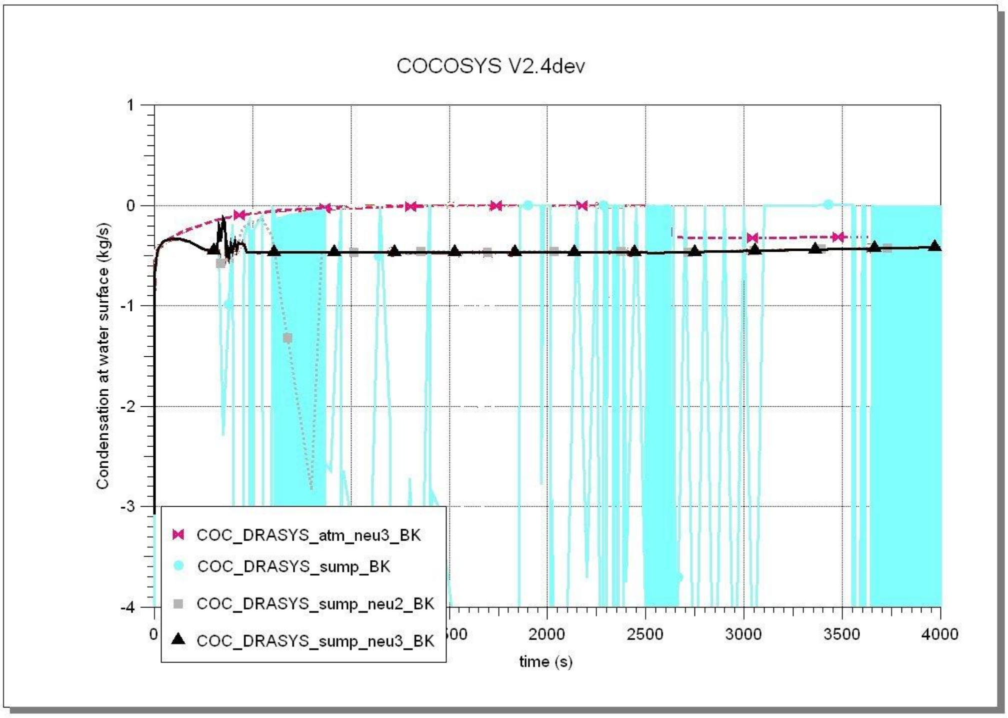


Abb. 4.33 COCOSYS-V2.4, Testbeispiel, Verdampfungsmassenstrom an der Sumpfoberfläche – Vergleich der Ausgangsvariante mit Korrektur nach IRSN (~neu2_BK) und Endversion (~neu3_BK)

Daraufhin wurde die Modellierung dahingehend geändert, dass sich anstatt des gesamten Pools nur noch die oberste Wasserschicht in Sättigung befindet und der untere Teil durch den hydrostatischen Druck der Wassersäule unterkühlt bleibt. Damit wird der freigesetzte Dampfmassenstrom kleiner und geglättet (Kurve "COC_DRASYS_SUMP_neu3_BK" in Abb. 4.33). Die Dicke dieser obersten Wasserschicht von 10 cm (Default-Wert) kann per Eingabe geändert werden. Die Validierung dieses Wertes steht noch aus; in den Testrechnungen war ihr Einfluss auf die berechneten Parameterverläufe allerdings gering.

Die Modelländerungen wurden in alle relevanten COCOSYS-Programmteile (Nichtgleichgewichts- und DRASYS-Zonenmodelle) implementiert und nach CPA übertragen.

Eine weitere Änderung im Modell des Poolsiedens – die Zeitkonstante TAU – ist unter Kapitel 4.2.2 im Zusammenhang mit der Kopplung zwischen Thermohydraulik und Beton-Schmelze-Wechselwirkung beschrieben.

4.4.1.3 SPARC-Probleme bei Fukushima-Analysen

In Rechnungen von IRSN zum Fukushima-Störfall traten in ASTEC/CPA Probleme im Pool-Scrubbing-Modell SPARC bei der Rückhaltung von Spaltprodukten im Druckabbausystem des Containments vom Typ Mark I auf (MARCUS Sheet CAD/2287/CPA). In der Simulation wurde SPARC auf 2 Verbindungen angewendet, die in einem gemeinsamen Pool enden. Da die Spaltproduktzusammensetzung (Isotopenmischung) in verschiedenen Zonen voneinander abweichen kann, muss im Spaltprodukttransportmodell FIPHOST neben der Poolzone (Endzone) auch die Startzone der Verbindung bekannt sein. Auf Grund der gegenwärtigen Kopplung von MAEROS und FIPHOST ist diese Information in FIPHOST nicht verfügbar, d. h. es erfolgt eine falsche Startzonenzuordnung, was zu einem Bilanzfehler der Spaltproduktmassen führt. In Abb. 4.34 ist zu sehen, dass der Spaltproduktmassenfehler exakt der im Pool zurückgehaltenen Aerosolmasse entspricht. Deshalb wurde eine entsprechende Abfrage implementiert, die jetzt die Anwendung von SPARC auf parallele, in einem Pool endende Verbindungen verhindert. Sollte sich aus weiteren Anwendungsrechnungen zeigen, dass solche parallelen Verbindungen erforderlich sind, kann sich hier weiterer Entwicklungsbedarf ergeben. Alternativ wird zzt. für solche Bedingungen eine feinere Nodalisierung mit Unterteilung des Pools in mehrere Zonen empfohlen.

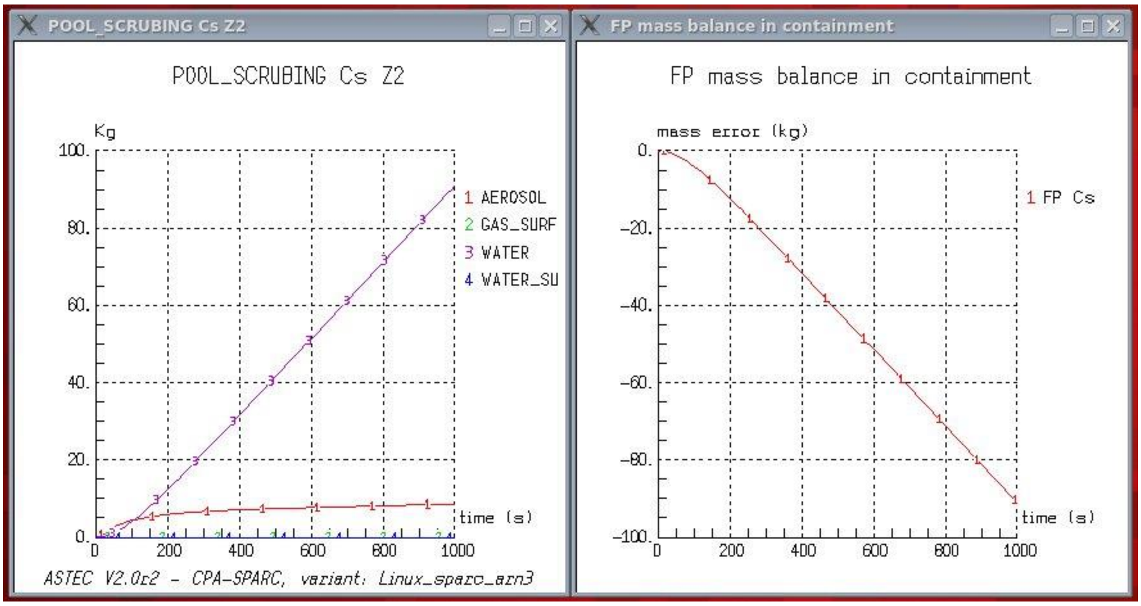


Abb. 4.34 ASTEC-V2.0, SPARC: Aerosolrückhaltung und Spaltproduktmassenbilanzfehler bei parallelen Poolscrubbing-Verbindungen

Da die Kopplung von Aerosol- und Spaltproduktmodell in ASTEC/CPA und COCOSYS im Wesentlichen gleich ist, trifft diese Einschränkung auch für COCOSYS zu, sodass

die Überprüfung des Eingabedatensatzes auf die gegenwärtig nicht mögliche Anwendung von parallelen Verbindungen in eine Pool-Scrubbing-Zone auch in COCOSYS übernommen wurde.

4.4.1.4 PROCO-Modell in ASTEC

Im Projektverlauf gab es mehrere Anfragen von externen ASTEC-Nutzern (u. a. IVS Trnava) zur Anwendung des Wasserstoffverbrennungsmodells PROCO in Analysen zum WWER-440/213. Ursprünglich wurde PROCO von IRSN entwickelt und in ASTEC implementiert. Inzwischen gibt es keinen PROCO-Spezialisten mehr bei IRSN und deshalb auch kaum entsprechende Anwendungen und wenig Erfahrungen mit diesem ASTEC-Modul. Die Bearbeitung der MARCUS-Sheets durch die GRS war aufgrund der notwendigen Einarbeitung in PROCO aufwendig.

Einerseits zeigte sich, dass die ‚Rule'-Dateien zum Test der PROCO-Eingabedaten unvollständig waren. Dadurch wurde nicht gewährleistet, dass der Anwender einen Hinweis zu fehlenden Daten erhielt. Dieses Manko wurde durch Vervollständigung der Datei „proco.rul" behoben. Zusätzlich wurden alle Print-Ausgaben von PROCO in einer separaten Datei gebündelt. Daneben wurde IVS bei der weiteren Vervollständigung ihres Datensatzes unterstützt.

Weitere Probleme traten bei der erforderlichen Definition der Verbindungsmatrix in der PROCO-Nodalisation auf. Das von der GRS entwickelte Hilfsprogramm NodalCmp zur Erstellung dieser Matrix wurde aktualisiert, am WWER-440/213-Datensatz überprüft und IVS Trnava zur Verfügung gestellt.

Weiterhin traten in PROCO-Rechnungen Unterschiede auf, sobald Änderungen am Datensatz gemacht wurden, die allerdings nicht das physikalische Modell betrafen – hier durch Einfügen einer neuen Online-Graphik durch eine VISU Struktur im Testdatensatz zum Experiment HX23 am Battelle Modellcontainment – Abb. 4.35. Erschwerend kam noch hinzu, dass dabei das Verhalten unter Linux und Windows Betriebssystemen voneinander abwich. Als Ursache stellte sich heraus, dass ein Integer-Vektor in PROCO nicht auf null gesetzt wurde und deshalb mit Zufallszahlen belegt war. In Abhängigkeit vom Wert der Vektorelemente wurde in PROCO entweder eine Flammenausbreitung entlang der Verbindungen simuliert oder nicht, mit dementsprechend abweichenden Druck- und Wasserstoffkonzentrationen.

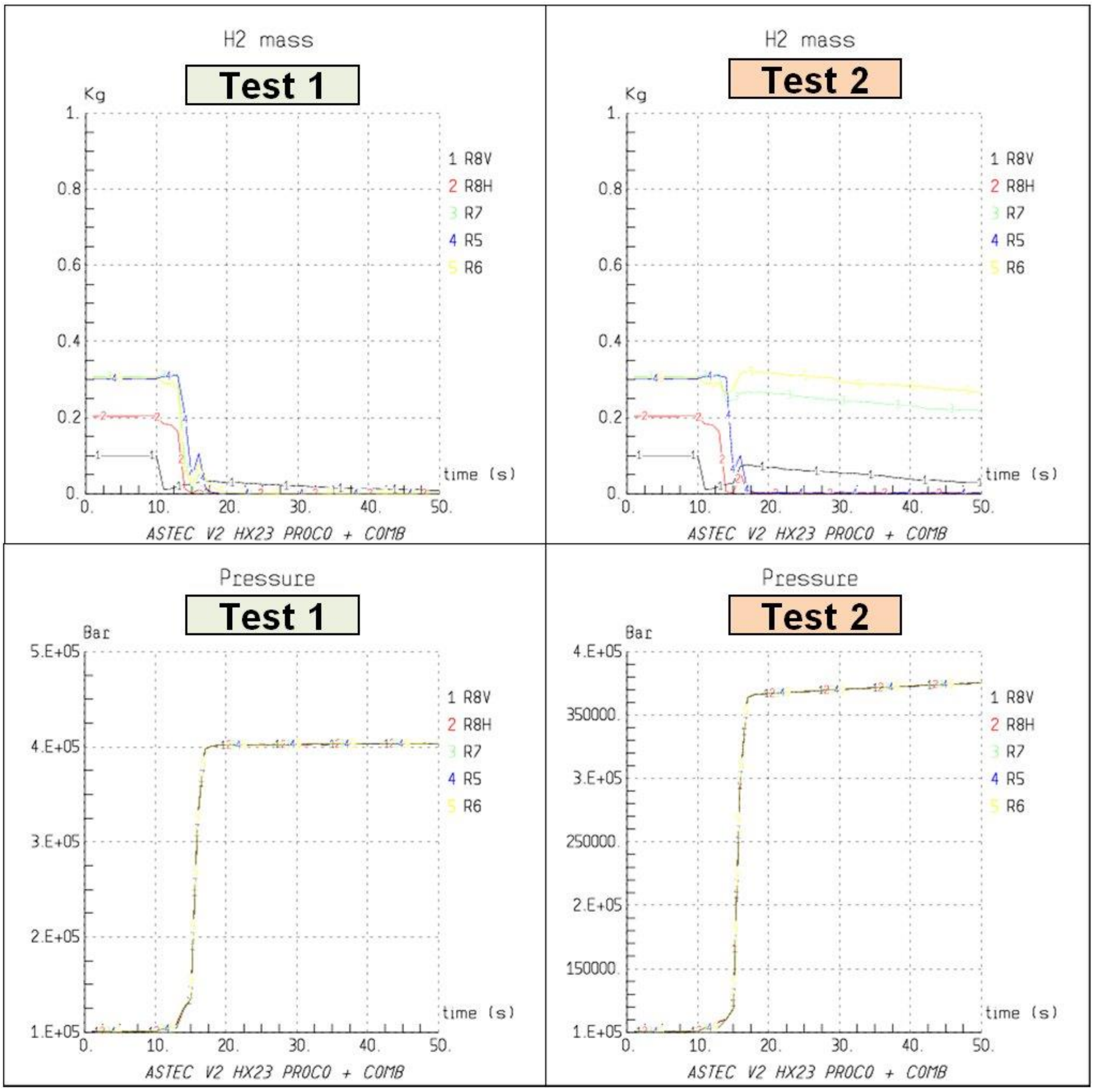


Abb. 4.35 ASTEC-V2.0, PROCO, HX23 Experiment: Unterschiedliche physikalische Ergebnisse mit PROCO ohne (Test1) und mit VISU (Test 2)

Die Programmkorrekturen sind im MARCUS-System unter den Referenznummern CAD/2062/PROCO und CAD/2183/PROCO dokumentiert. Alle Programmänderungen wurden im nächsten ASTEC-Patch verfügbar gemacht. Das PROCO-Modul wird allerdings nicht weiterentwickelt und ist zudem nicht in COCOSYS enthalten, sodass die beschriebenen Modelländerungen keine Relevanz für COCOSYS haben.

Die Modellansätze von PROCO wurden durch die GRS weiterentwickelt und mündeten schließlich im neuen Wasserstoffverbrennungs- und Flammenausbreitungsmodell FRONT. FRONT ist sowohl in ASTEC/CPA als auch COCOSYS verfügbar und wird als Standardmodell zur Wasserstoffverbrennungssimulation empfohlen.

4.4.1.5 Virtuelle Verbindungen in ASTEC/CPA

ASTEC wird seit kurzem auch von der indischen Aufsichtsbehörde AERB angewendet. Dort traten Probleme bei der Definition von sogenannten virtuellen Verbindungen auf. Das sind Verbindungen zwischen Zonen, die einen physikalischen Anlagenraum abbilden. Insbesondere hatte AERB in einem CPA-Datensatz die Verbindungslänge LEN auf 0 m gesetzt, was in einem Programmabsturz ohne jegliche Fehlermitteilung resultierte. Die Überprüfung der Eingabedaten in den ‚Rule'-Dateien wurde daraufhin um einen bisher fehlenden Test auf Verbindungslängen kleiner/gleich Null ergänzt; die Änderungen sind im MARCUS-System von ASTEC dokumentiert (CAD/2648/CPA). Ein entsprechender Test existierte bereits in COCOSYS.

Daneben wurden für AERB Unterlagen bereitgestellt, in denen die Modellansätze bezüglich der verschiedenen atmosphärischen Verbindungstypen in CPA näher erläutert sind. Insbesondere wurde zur Verdeutlichung des Einflusses der Verbindungslänge LEN eine Parameterrechnung durchgeführt (zeitliches Verhalten und Maximalwert des berechneten Massenstromes durch zunehmende Rohrreibung – Abb. 4.36).

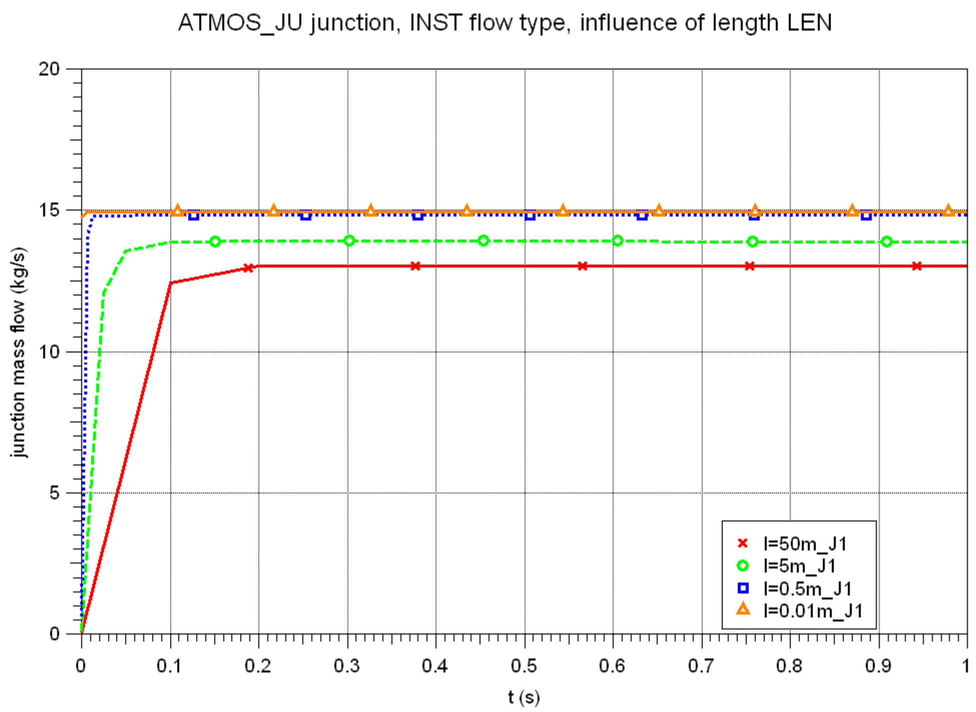


Abb. 4.36 ASTEC-V2.0, CPA: Parameterrechnung zum Einfluss der Verbindungslänge LEN in Atmosphärenverbindungen

4.4.1.6 Überarbeitung von CPA-Datensätzen nach Umstellung von CPA auf MDB-Stoffwerte in ASTEC-V2.1

In der ASTEC-Entwicklerversion V2.1 wurden von IRSN inzwischen im Zuge der Harmonisierung des Integralcodes auch in CPA die Stoffwertberechnungen auf Basis der MDB (material data bank) umgestellt. Damit war z. B. die Verwendung von AIR als Gaskomponente im Containment nicht mehr möglich und erforderte dessen Ersetzung durch N_2 und O_2. Mit Nutzung der MDB haben jetzt die Enthalpien der Stoffkomponenten einen anderen Referenzpunkt. Dies machte eine Überarbeitung und die Anpassung von CPA-Datensätzen erforderlich, um die allgemeine Ablauffähigkeit von Testdatensätzen wiederherzustellen und die Ergebnisse alter Validierungsrechnungen reproduzieren zu können. In diesem Zusammenhang wurden durch die GRS eine Reihe von CPA-Versuchsnachrechnungen, die in der ASTEC-Basis-Validierungsmatrix enthalten sind, wiederholt.

Auf Grund von Erweiterungen im ASTEC-Input-Checker (in den ‚Rule'-Dateien) durch IRSN waren Anlagendatensätze unter Nutzung des DRASYS-Zonenmodells nicht mehr ablauffähig. Durch die Komplexität der verknüpften ‚Rule'-Dateien war hier Unterstützung von IRSN erforderlich. IRSN erstellte eine Erweiterung zur Prüfung von Drainageverbindungen für die Nutzung des Verbindungstyps ‚SUMP_BAL' in Kombination mit DRASYS-Zonen (‚RESTmin'-Regel in der Datei ‚rule.rul'). Diese wurde von der GRS anhand von Anlagen- und Validierungsfällen getestet und freigegeben.

4.4.1.7 Anwendung des Regressionstestens

In Rahmen der Erhöhung der Qualitätskontrolle wurde für COCOSYS-V2.4v0 vor der Programmfreigabe erstmals das sogenannte Regressionstesten angewendet. Dieses Verfahren bietet bei seiner Anwendung auf die jeweils aktuelle Entwicklerversion aber auch die Möglichkeit, frühzeitig (d. h. nicht erst bei der Freigabeprozedur) unvollständig implementierte Modelle zu identifizieren und Programmfehler festzustellen.

So wurde im Testfall zu GKSS-M1 nach einem Restart eine Instabilität im DRASYS Modell aufgedeckt, die auf unvollständigen Restartdaten beruhte. In einem weiteren Beispiel wurden Unterschiede in der Aerosolablagerung durch Thermophorese nach einem Restart beim VANAM-M3-Experiment festgestellt. Als Basis für die Thermophorese dienen Ablagerungskoeffizienten, die für die aktuellen Temperaturgradienten in

der Grenzschicht zwischen Atmosphäre und Wandoberfläche berechnet werden. Ändern sich diese Temperaturgradienten um mehr als 3 %, werden die Ablagerungskoeffizienten jeweils neu berechnet. Da diese Gradienten nicht in der Restart-Datei abgespeichert wurden, konnte das Auftreten dieser Änderung nicht korrekt überprüft und damit berücksichtigt werden.

Das Regressionstesten ist besonders sinnvoll bei Modellen, die in der GRS selten oder nicht angewendet werden. Als Beispiel sei hier das für FORTUM in COCOSYS implementierte Modell für den Zwischenkühler (Intermediate-cooling-Circuit) für das finnische KKW Loviisa genannt. Durch Änderungen im Programmablauf das THY-Hauptmoduls war die korrekte Initialisierung der Temperatur des Kühlkreislaufes nicht mehr gegeben mit der Folge falsch berechneter Energieströme.

4.4.1.8 Symmetrieprobleme FEBE/FTRIX

Die Ursache eines Fehlers (Symmetrieprobleme bei der Erstellung der Jakobimatrix in der Routine FTRIX) im FEBE-Paket (Paket zur Lösung der Differentialgleichungen) wurde identifiziert und behoben: Das Unterprogramm FTAB1 im FEBE/FTRIX-Paket wurde korrigiert. Die Korrekturen wurden in COCOSYS und ASTEC/CPA implementiert.

4.4.1.9 Korrekturen nach Regressionstesten für THAI-TH7, -TH10

Im Rahmen des Regressionstestens für die Fertigstellung der COCOSYS-Version V2.4 fielen entsprechende Arbeiten an. So wurden auftretende Unterschiede, welche beim Regressionstesten aufgetreten sind, geklärt bzw. das Programm entsprechend korrigiert. Unterschiede in den Ergebnissen zu THAI-TH7, -TH10 wurden auf einen Fehler in der älteren V2.3-Version zurückgeführt. Die Rechnung zu TH10 mit V2.4 wird im Hinblick auf die Schichtung zurzeit noch überarbeitet.

4.4.1.10 Umstellung auf SVN und TeamForge

Bisher wurde COCOSYS mit Hilfe des Versionsverwaltungssystems CVS (Concurrent Version System) verwaltet. Um die Qualitätssicherung der Programmentwicklungen in der GRS zu verbessern, wurde entschieden, dass alle in der GRS entwickelten Re-

chencodes mit Hilfe von SVN (Subversion) konfiguriert werden. SVN ist moderner und bietet verschiedene Vorteile. So kann das SVN-Tool direkt in die Entwicklungsumgebung (z. B. Visual Studio) eingebunden und verwendet werden. Sämtliche Projekte mit Programmentwicklung werden unter Teamforge verwaltet. Somit stehen umfangreiche Hilfsmittel zur Planung und Dokumentation von Softwareprojekten zur Verfügung.

Für den Transfer von CVS nach SVN wurde das Werkzeug „CVS2SVN“ (unter Ubuntu 11.10) verwendet. Dazu wurde über ein sogenanntes ‚tar‘-Archiv das gesamte CVS-Repository auf den Ubuntu-Rechner kopiert. Da einzelne Log-Messages in Deutsch mit Umlauten geschrieben waren, musste zusätzlich die Option `–encoding=ISO-8859-1` verwendet werden. Weiterhin wurden einzelne nicht mehr benötigte Verzeichnisse (z. B. altes Plotprogramm, Input-Graphik, ATHLET-CD ohne Verwendung von Unterverzeichnissen) entfernt.

Die Ausgabe von CVS2SVN nach Konversion war wie folgt:

```
cvs2svn Statistics:
------------------
Total CVS Files:               9141
Total CVS Revisions:          28496
Total CVS Branches:           26537
Total CVS Tags:              124940
Total Unique Tags:               59
Total Unique Branches:           12
CVS Repos Size in KB:        689637
Total SVN Commits:             5382
First Revision Date:  Tue Oct 21 13:45:47 1997
Last Revision Date:     Wed Apr 10 14:43:41 2013
```

4.4.1.11 Überprüfung und Verbesserung des Restarts

In COCOSYS gibt es die Möglichkeit, einen sogenannten „exakten“ Restart auszuführen. Diese Option wird vor allem zur Überprüfung des Restartvektors verwendet. Anhand eines einfachen Testbeispiels mit einer Vielzahl von Modellen sowie einem Restart während einer transienten Phase wurde festgestellt, dass der Restart für das DRASYS-Modell nicht ganz vollständig war. Ferner ist darauf zu achten, dass die Bestimmung der absoluten Genauigkeitsgrenzen nicht von variablen Größen abhängt, so dass beim Restart etwas andere Grenzen verwendet werden. Entsprechende Fehler wurden korrigiert. Überprüft wurde der Restart in Bezug auf Aerosolkoeffizienten. Ent-

gegen der ursprünglichen Version werden diese nicht mehr in einer separaten Datei abgespeichert. Abgespeichert werden lediglich die thermohydraulischen Randbedingungen, welche für die Koeffizienten zur Berechnung der Thermophorese sowie der Diffusiophorese benötigt werden. Somit können dann beim Restart die Aerosolkoeffizienten wieder hergestellt werden.

4.4.1.12 Parallele gekoppelte Rechnungen unter ATLAS

Grundsätzlich ist es unter ATLAS Version 5 möglich, mehrere gekoppelte Rechnungen parallel durchzuführen. Es wurde allerdings beobachtet, dass unter bestimmten Randbedingungen die Rechnungen vorzeitig fehlerhaft abgebrochen wurden (meistens nach Auslösen einer sogenannten Fehlfunktion). Als Ursache wurde das sogenannte Logfile, in dem gerade die Auslösung von Fehlfunktionen dokumentiert wird, identifiziert, welches sowohl von ATHLET als auch dem COCOSYS-Treiber geschrieben wird. Die Simulatorschnittstelle wurde so modifiziert, dass nur noch der COCOSYS-Treiber diese Datei schreibt. Eine Testrechnung wurde erfolgreich durchgeführt.

4.4.1.13 Vervollständigung der vereinfachten Stoffwerte

Bei der Verwendung des Wärmeübergangsmodells CO1 in Kombination mit der Option für die Berechnung von „vereinfachten“ Stoffwerten wurde festgestellt, dass einige Stoffwerte für diese Option noch nicht verfügbar sind. Diese (Prandtl-Zahl für Wasser, Dichte des Dampfes bei Wandtemperatur) wurden ergänzt (Routine „mpssz.f“).

4.4.1.14 Mehrfache Kondensationsrohre in eine Wasservorlage

In gekoppelten ATHLET-CD/COCOSYS Rechnungen für einen Siedewasserreaktor gibt es verschiedene Verbindungen in die Wasservorlage der Kondensationskammer. Dies sind zum einen die S&E-Ventile zur Druckentlastung des Kühlkreislaufs und die Kondensationsrohre von der Druckkammer des Containments in die Kondensationskammer. Bei den Rechnungen zeigte sich eine fehlerhafte Berechnung der „abgelagerten“ Aerosolmasse (also der über Pool-Scrubbing ausgewaschenen Aerosolmasse). Bei mehrfachen Verbindungen mit Ankopplung von SPARC in eine Wasservorlage wurde nur eine Verbindung für diese Berechnung berücksichtigt. Dieser Fehler wurde korrigiert und anhand eines einfachen Testbeispiels (‚2pool‘) überprüft.

4.4.1.15 Absturz bei Restart von gekoppelten Rechnungen unter ATLAS

Beim Restart von gekoppelten Online-Rechnungen mit ATHLET-CD und COCOSYS unter Verwendung von ATLAS kam es zum fehlerhaften Programmabbruch. Als Ursache wurden fehlerhafte Schlüsselwörter in den Bildern (APC-Files) identifiziert. Bei Auslösen von Fehlfunktionen über Skripte in Verbindung mit falschen Schlüsselwörtern wurde eine leere Zeichenkette im Restart-Vektor abgelegt. Beim Einlesen dieses Restartvektors kam es dann zum Programmabbruch. Fehlerhafte Schlüsselwörter werden in der Datei „simu_errors.txt“ aufgelistet. Wird nun eine solche „fehlerhafte“ Fehlfunktion ausgelöst, stoppt das Programm mit einer Fehlermeldung in der Datei „ersa.d“. Die fehlerhaften Bilder wurden ebenfalls korrigiert.

4.4.1.16 Probleme bei der Simulation des Abblasetanks

In gekoppelten ATHLET-CD/COCOSYS Rechnungen wird das Verhalten des Abblasetanks in COCOSYS simuliert, da in ATHLET-CD kein Modell zur Simulation des Poolscrubbings existiert. Für die Kopplung wird als Zielobjekt eine COCOSYS-Verbindung mit dem Verbindungstyp INTF_JUN angegeben. Bisher war es nicht möglich die Eintauchtiefe dieser Verbindung in die Wasservorlage anzugeben. Daher wurde der Energieeintrag immer vollständig in den Pool übertragen. In Fällen, in denen der Pool vollständig verdampft, führte dies zu entsprechenden Problemen (z. B. zum Abbruch wegen zu hoher Wassertemperaturen). In der aktuellen COCOSYS-Version ist es nun möglich, – ähnlich wie bei der vereinfachten Simulation von Kondensationsrohren – eine Eintauchtiefe sowie einen Rohrdurchmesser vorzugeben (‚INSERTION‘-Option). Bei entsprechenden niedrigen Wasserständen erfolgt dann der Energieantrag direkt in die Atmosphäre und das SPARC Modul wird ausgeschaltet. Die neue Option wurde anhand eines entsprechenden Beispiels überprüft.

4.4.1.17 Vergleich der COCOSYS-Anwendung auf den Betriebssystemen Windows 7 und Ubuntu

Die COCOSYS Version V2.4 ist sowohl für die Plattform Windows 7 als auch für das Linux-Betriebssystem Ubuntu verfügbar. Anwendungsrechnungen /BAN 12/ im Rahmen des COCOSYS-Regressionstestens zeigten unterschiedliche Ergebnisse für einzelne Räume (z. B. Reaktorraum „RRAUM“ oberhalb des Reaktors) zwischen diesen Plattformen. Abb. 4.37 zeigt die verwendete Nodalisierung sowie den betrachteten

Raum (Reaktorraum, rot umrandet). Dieser Raum ist nur durch zwei Druckausgleichsklappen (DAK38 und DAK40) mit dem restlichen Containment verbunden. In der ursprünglichen Rechnung wurde für die Dämpfung der Klappen der Wert 250 verwendet. Durch den hohen Wert wird aber die Dämpfung übersteuert und führt zu Instabilitäten. In einer modifizierten Rechnung wurde dieser Wert auf 15 reduziert.

Die erzielten Ergebnisse für die gesamte Iodmasse im Compartment RRAUM sind in Abb. 4.38 dargestellt. Die Compiler-Optionen sind so eingestellt, dass mit Debug und Release-Version exakt die gleichen Ergebnisse erzielt werden. Dies wurde durch den Vergleich der Ausdrucke in der Rechnung bis 24 000 s nachgewiesen. Folgende Optionen werden dabei verwendet:

- Für die Release-Version:
  `/debug:minimal /Oy- /fpp /fpe:0 /fp:strict /Qfp-speculation=off  /traceback`
- Für die Debug-Version:
  `/debug:full /Od /fpp /stand:f90 /warn:all /debug-parameters:used /Qtrapuv /fpe:0 /fp:strict /Qfp-speculation=off /traceback /check:all /libs:static /dbglibs`

Unter dem Betriebssystem Ubuntu werden die diesen entsprechenden Optionen verwendet:

- Für die Release-Version:
  `-O2 -traceback -fno-omit-frame-pointer -debug minimal -fpe0 -fp-speculation off -fp-model strict`
- Für die Debug-Version:
  `-g -debug-parameters all -debug all -check all -traceback -fpe0 -fp-speculation off -fp-model strict -ftrapuv`

Die Rechnung unter Ubuntu (64-bit) zeigt dabei abweichende Resultate. Da unter diesem 64bit-Betriebssystem die Zahlendarstellung unterschiedlich ist, können auch die Rechenergebnisse etwas unterschiedlich sein. Gerade bei Instabilitäten (hier die Klappen, Abb. 4.39) können sich dabei unterschiedliche Resultate ergeben (z. B. auch für die Temperaturen, Abb. 4.40). Nach Änderung der Dämpfungswerte sind die Ergebnisse für Windows 7 (‚DOS_REL‘) und Ubuntu (‚UBU_REL‘) im Wesentlichen gleich.

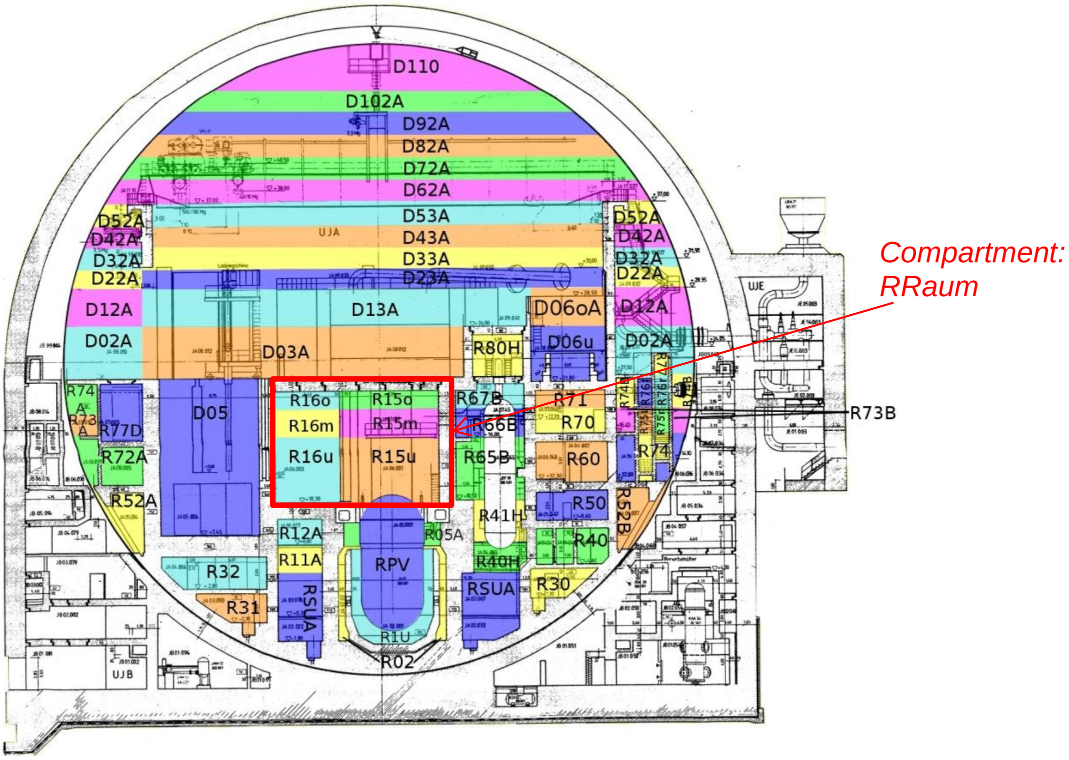


Abb. 4.37 Verwendete Nodalisierung der KONVOI-Anlage (Schnitt A-A)

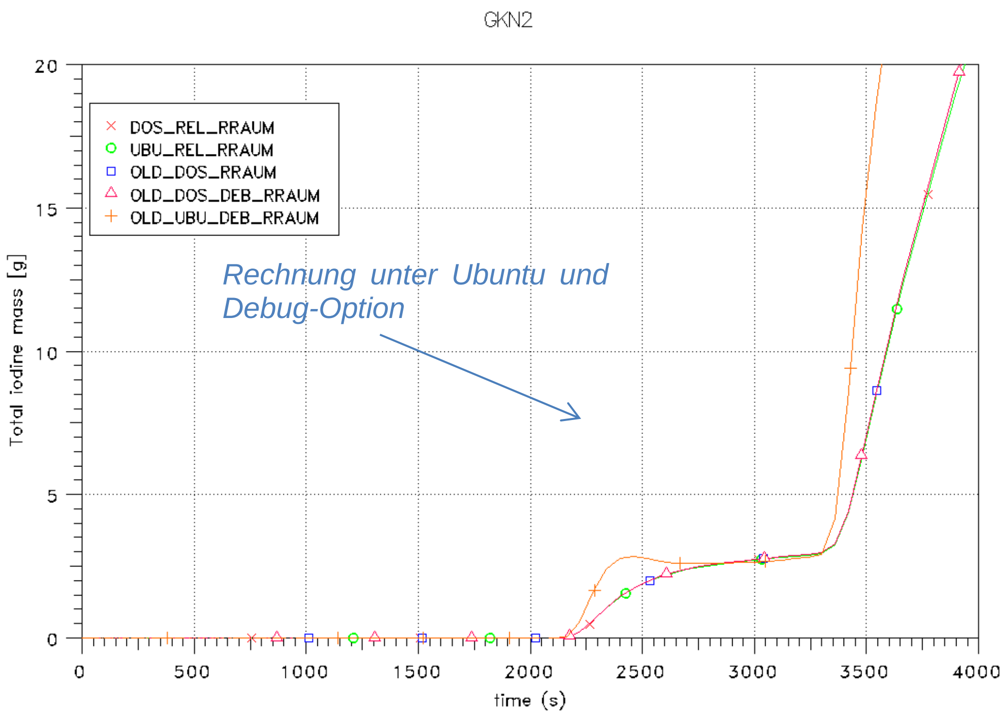


Abb. 4.38 Gesamte Iodmasse im Compartment RRAUM

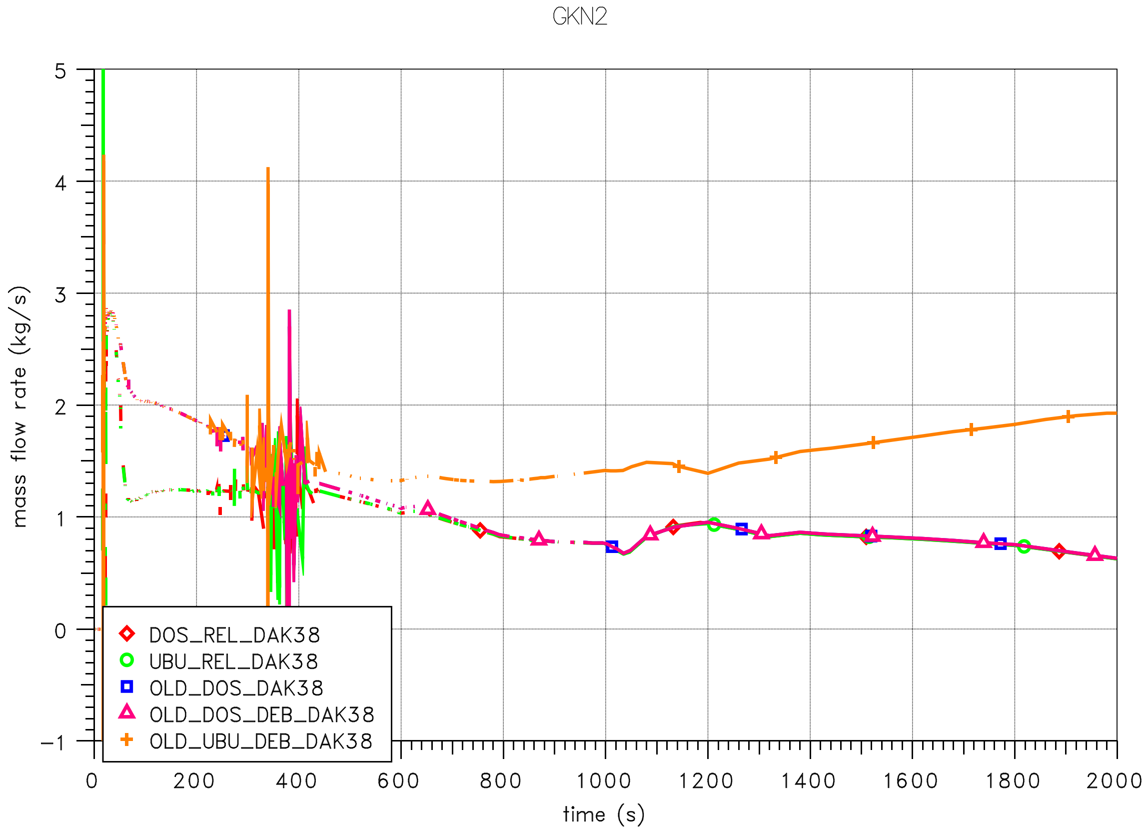


Abb. 4.39 Massenstrom durch die Klappe DAK38

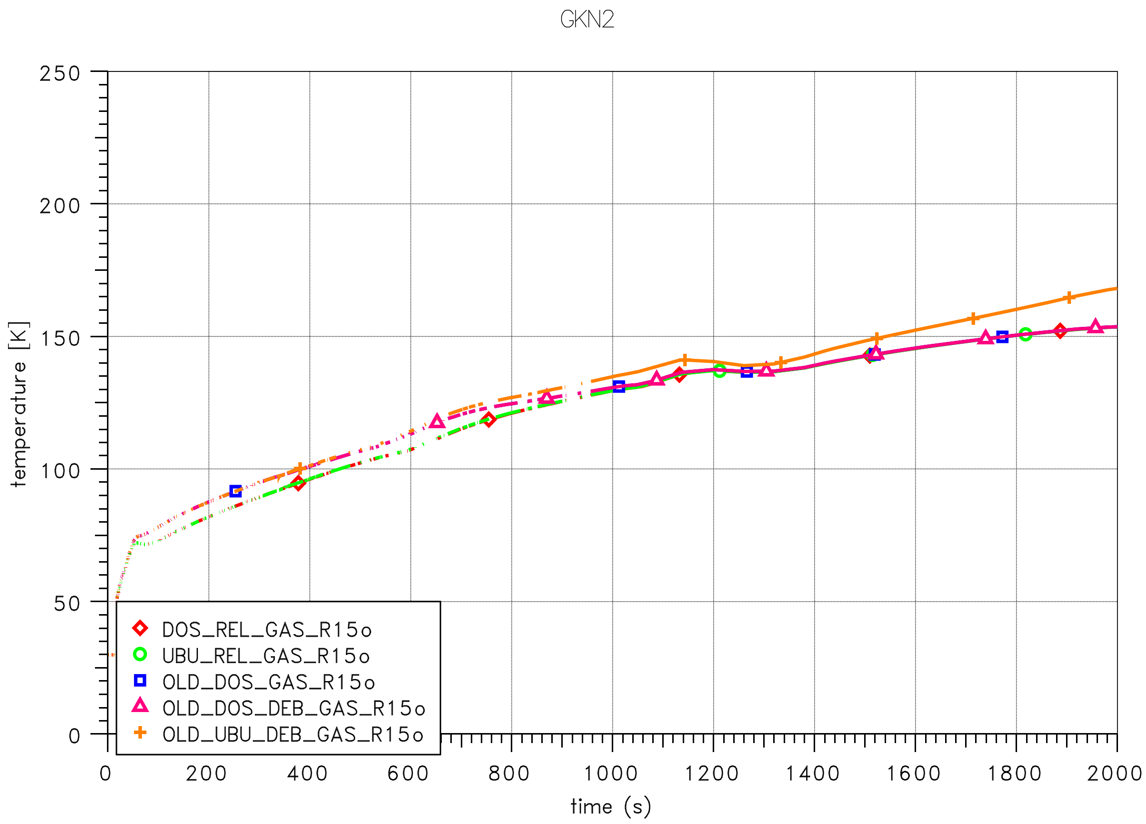


Abb. 4.40 Berechnete Atmosphärentemperatur in Zone R15o

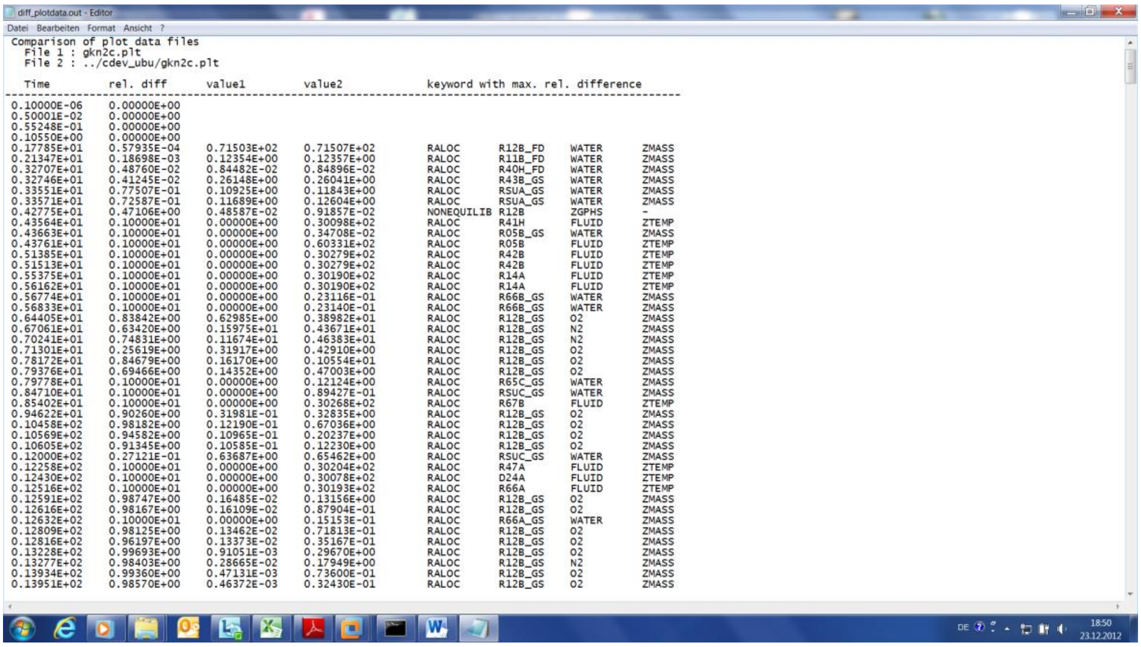
Der Unterschied zwischen beiden Rechnungen wurde durch einen punktuellen Vergleich der Rechenergebnisse festgestellt. Ein systematischer Vergleich wäre einem punktuellen Vergleich aber überlegen. Daher wurde das Tool „DIFF_PLOTDATA“ entwickelt, mit welchem zwei Ergebnisdateien (Plotdateien) vollständig verglichen werden können. Voraussetzung ist, dass die Schlüsselwortlisten in beiden Rechnungen gleich sind. DIFF_PLOTDATA hat folgende Eigenschaften:

- Die Ergebnisse der zweiten Rechnung werden auf die Zeitpunkte der ersten Rechnung interpoliert. Falls einer der Datenpunkte in der zweiten Rechnung nicht existiert, werden die Werte auf 0 gesetzt. Der Vergleich findet dann mit dem nächsten der Datenpunkte statt.
- Für den Vergleich gibt es 3 Optionen:
  - Option 1: Es werden alle Variablen verglichen. Die Genauigkeit wird generell auf 10^{-10} gesetzt.
  - Option 2: Für eine (feste) Liste von Variablen werden spezifische Genauigkeiten verwendet.
  - Option 3: Es werden nur bestimmte Variablen mit spezifischen Genauigkeiten verglichen.
- Ausgegeben wird für jeden Datenpunkt (aus dem ersten File) die maximale relative Abweichung

  $$x = \frac{|v_1 - v_2|}{\max(|v_1|,|v_2|)}$$

  sowie das zugehörige Schlüsselwort. Für die Feststellung des exakten Vergleichs ist Option 1 notwendig. Um festzustellen, ob relevante Unterschiede bestehen, kann Option 3 verwendet werden. Ein Ausgabebeispiel ist in Abb. 4.41 gezeigt.

Die Unterschiede zwischen den Ergebnissen auf verschiedenen Rechnerplattformen sollten weiter verfolgt werden. Daher sollte u. a. das Regressionstesten konsequent auf beiden Betriebssystemen durchgeführt werden. Wichtig ist, dass die sicherheitsrelevanten Aussagen auf den angewendeten Rechnerplattformen gleich sind. Beispielsweise ist in Abb. 4.42 die U-238 Masse in der obersten Ringraumzone U45 gezeigt.



```
Comparison of plot data files
  File 1 : gkn2c.plt
  File 2 : ../cdev_ubu/gkn2c.plt

  Time         rel. diff    value1       value2            keyword with max. rel. difference
-------------------------------------------------------------------------------------------
0.10000E-06  0.00000E+00
0.50001E-02  0.00000E+00
0.55248E-01  0.00000E+00
0.10550E+00  0.00000E+00
0.17785E+01  0.57935E-04  0.71503E+02  0.71507E+02  RALOC      R12B_FD   WATER   ZMASS
0.21347E+01  0.18698E-03  0.12354E+00  0.12357E+00  RALOC      R11B_FD   WATER   ZMASS
0.32707E+01  0.48760E-02  0.84482E-02  0.84896E-02  RALOC      R40H_FD   WATER   ZMASS
0.32746E+01  0.41245E-02  0.26148E+00  0.26041E+00  RALOC      R43B_GS   WATER   ZMASS
0.33551E+01  0.77507E-01  0.10925E+00  0.11843E+00  RALOC      RSUA_GS   WATER   ZMASS
0.33571E+01  0.72587E-01  0.11689E+00  0.12604E+00  RALOC      RSUA_GS   WATER   ZMASS
0.42775E+01  0.47106E+00  0.48587E-02  0.91857E-02  NONEQUILIB R12B      ZGPHS   -
0.43564E+01  0.10000E+01  0.00000E+00  0.30098E+02  RALOC      R41H      FLUID   ZTEMP
0.43663E+01  0.10000E+01  0.00000E+00  0.34708E-02  RALOC      R05B_GS   WATER   ZMASS
0.43761E+01  0.10000E+01  0.00000E+00  0.60331E+02  RALOC      R05B      FLUID   ZTEMP
0.51385E+01  0.10000E+01  0.00000E+00  0.30279E+02  RALOC      R42B      FLUID   ZTEMP
0.51513E+01  0.10000E+01  0.00000E+00  0.30279E+02  RALOC      R42B      FLUID   ZTEMP
0.55375E+01  0.10000E+01  0.00000E+00  0.30190E+02  RALOC      R14A      FLUID   ZTEMP
0.56162E+01  0.10000E+01  0.00000E+00  0.30190E+02  RALOC      R14A      FLUID   ZTEMP
0.56774E+01  0.10000E+01  0.00000E+00  0.23116E-01  RALOC      R66B_GS   WATER   ZMASS
0.56833E+01  0.10000E+01  0.00000E+00  0.23140E-01  RALOC      R66B_GS   WATER   ZMASS
0.64405E+01  0.83842E+00  0.62985E+00  0.38982E+01  RALOC      R12B_GS   O2      ZMASS
0.67061E+01  0.63420E+00  0.15975E+01  0.43671E+01  RALOC      R12B_GS   N2      ZMASS
0.70241E+01  0.74831E+00  0.11674E+01  0.46383E+01  RALOC      R12B_GS   N2      ZMASS
0.71301E+01  0.25619E+00  0.31917E+00  0.42910E+00  RALOC      R12B_GS   O2      ZMASS
0.78172E+01  0.84679E+00  0.16170E+00  0.10554E+01  RALOC      R12B_GS   O2      ZMASS
0.79376E+01  0.69466E+00  0.14352E+00  0.47003E+00  RALOC      R12B_GS   O2      ZMASS
0.79778E+01  0.10000E+01  0.00000E+00  0.12124E+00  RALOC      R65C_GS   WATER   ZMASS
0.84710E+01  0.10000E+01  0.00000E+00  0.89427E-01  RALOC      RSUC_GS   WATER   ZMASS
0.85402E+01  0.10000E+01  0.00000E+00  0.30268E+02  RALOC      R67B      FLUID   ZTEMP
0.94622E+01  0.90260E+00  0.31981E-01  0.32835E+00  RALOC      R12B_GS   O2      ZMASS
0.10458E+02  0.98182E+00  0.12190E-01  0.67036E+00  RALOC      R12B_GS   O2      ZMASS
0.10569E+02  0.94582E+00  0.10965E-01  0.20237E+00  RALOC      R12B_GS   O2      ZMASS
0.10605E+02  0.91345E+00  0.10585E-01  0.12230E+00  RALOC      R12B_GS   O2      ZMASS
0.12000E+02  0.27121E-01  0.63687E+00  0.65462E+00  RALOC      RSUC_GS   WATER   ZMASS
0.12258E+02  0.10000E+01  0.00000E+00  0.30204E+02  RALOC      R47A      FLUID   ZTEMP
0.12430E+02  0.10000E+01  0.00000E+00  0.30078E+02  RALOC      D24A      FLUID   ZTEMP
0.12516E+02  0.10000E+01  0.00000E+00  0.30193E+02  RALOC      R66A      FLUID   ZTEMP
0.12591E+02  0.98747E+00  0.16485E-02  0.13156E+00  RALOC      R12B_GS   O2      ZMASS
0.12616E+02  0.98167E+00  0.16109E-02  0.87904E-01  RALOC      R12B_GS   O2      ZMASS
0.12632E+02  0.10000E+01  0.00000E+00  0.15153E-01  RALOC      R66A_GS   WATER   ZMASS
0.12809E+02  0.98125E+00  0.13462E-02  0.71813E-01  RALOC      R12B_GS   O2      ZMASS
0.12816E+02  0.96197E+00  0.13373E-02  0.35167E-01  RALOC      R12B_GS   O2      ZMASS
0.13228E+02  0.99693E+00  0.91051E-03  0.29670E+00  RALOC      R12B_GS   O2      ZMASS
0.13277E+02  0.98403E+00  0.28665E-02  0.17949E+00  RALOC      R12B_GS   N2      ZMASS
0.13934E+02  0.99360E+00  0.47131E-03  0.73600E-01  RALOC      R12B_GS   O2      ZMASS
0.13951E+02  0.98570E+00  0.46372E-03  0.32430E-01  RALOC      R12B_GS   O2      ZMASS
```

Abb. 4.41 Ausgabebeispiel von DIFF_PLOTDATA

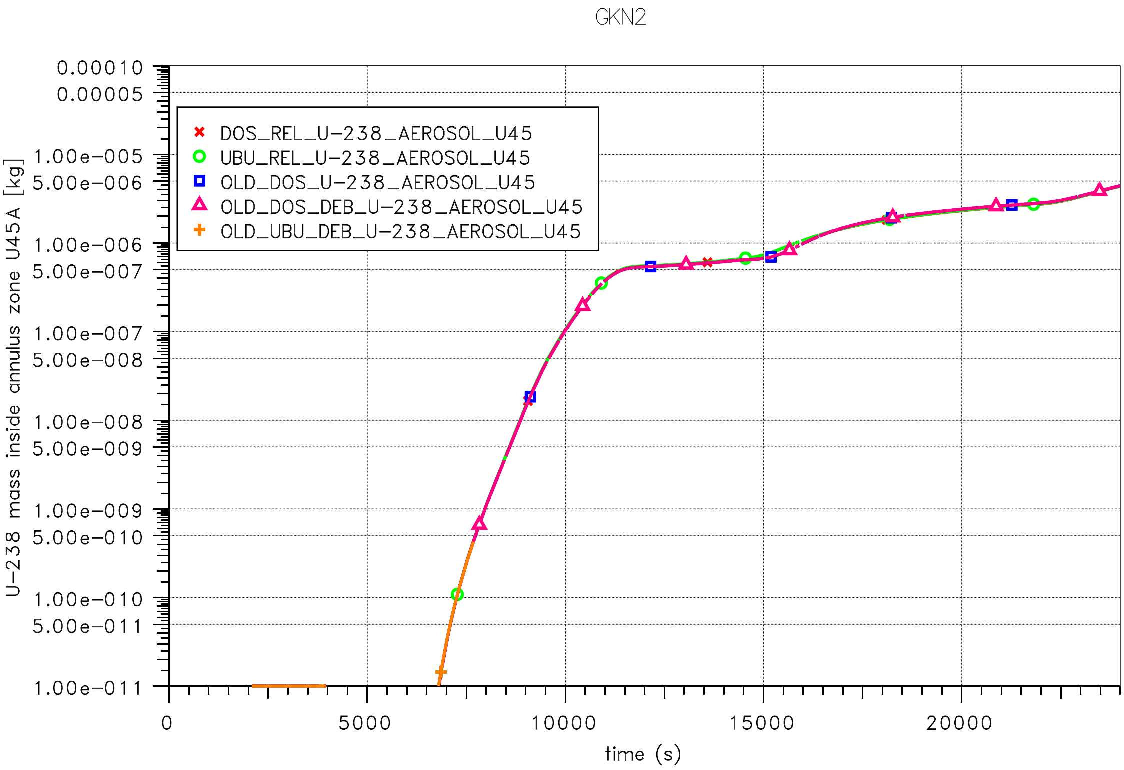


Abb. 4.42 U-238-Masse in oberster Ringraumzone U45

4.4.1.18 Unterstützung der externe Anwendung von MEDICIS

Bei AREVA sowie bei der Ruhr-Universität Bochum (RUB) befindet sich MEDICIS zurzeit in der Anwendung mit COCOSYS (AREVA) bzw. mit ASTEC (RUB) im Rahmen der Forschungsvorhaben 1501457 „Analyse des Einflusses Containment-typischer Phänomene auf die Spaltproduktverteilung“ (AREVA) bzw. 1501433 „Analyse und Bewertung der ASTEC Modellbasis (ASMO)“ (RUB). Da das MCCI-Modul MEDICIS mit diesen ersten Projekten erstmalig bei externen Forschungseinrichtungen in Deutschland erprobt wird bzw. zur Anwendung kommt, nachdem die GRS bereits seit längerer Zeit auf MEDICIS zur Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung in COCOSYS und ASTEC setzt, war seitens GRS eine intensive Nutzerbetreuung nötig.

Die mit COCOSYS/MEDICIS aufgetretenen Probleme bei AREVA sind teilweise auch darauf zurückzuführen, dass die Ein- und Ausgabe von MEDICIS noch nicht vollständig mit dem COCOSYS-Standard harmonisiert ist, sondern noch sehr viele ASTEC-typische Elemente aufweist. Verbesserungen sind hierzu im Rahmen der Codekonsolidierung von COCOSYS im kommenden anschließenden Projekt geplant.

Mit RUB wurde eine gemeinschaftliche Arbeit zur Bewertung der Skalierbarkeit der Phänomene bei der Schmelze-Beton-Wechselwirkung erstellt und in einer Veröffentlichung zusammengefasst /SPE 14/. RUB trug zu dieser Arbeit mit ASTEC/MEDICIS-Rechnungen zum Experiment ACE-L2 sowie zu einem generischen Reaktorszenario bei. Die Randbedingungen, die Durchführung und die Auswertung der Rechnungen wurden zwischen RUB und GRS abgesprochen. Die Ergebnisse wurden von der GRS für die Bewertung des Modellstandes in MEDICIS im CESAM-Projekt ausgewertet. Diese sind in Abschnitt 4.3.3.4 auf Seite 195f skizziert. Weitere Arbeiten von RUB zu ASTEC/MEDICIS fanden im Rahmen des Projektes 1501433 zur Validierung des Spaltproduktfreisetzungsmodells in MEDICIS statt. Hierbei wurde von RUB ein Fehler bei der Summierung von freigesetzten Massen des Elementes ‚Mo‘ identifiziert, an GRS kommuniziert und nach Überprüfung von GRS über das MARCUS-Sheet an IRSN weitergegeben. Von IRSN wurde umgehend eine Korrektur in der zugehörigen MDB-Datei durchgeführt. In weiteren Einzelfragen wurde gegenüber RUB Hilfestellung zur Datensatzerstellung, Wahl von Modellparametern und zur Durchführung und Auswertung von Rechnungen geleistet.

4.4.1.19 Verbrennungsmodell FRONT

Aufgrund des Rückflusses aus der Validierung (hier zeigten sich Abweichungen in wesentlichen physikalischen Größen, wenn vom gleichen stationären Zustand zu verschiedenen Zündzeitpunkten gestartet wurde) konnten umfangreiche Korrekturen am Verbrennungsmodell FRONT in ASTEC und COCOSYS durchgeführt werden. Dies betraf insbesondere die Korrelation zu Verbrennungsturbulenzen, welche im Ursprungscode fälschlicherweise als Ableitung berechnet wurde. In diesem Kontext wurde die Programmstruktur verbessert, so werden z. B. die verschiedenen Größen, die in die Flammenfrontgeschwindigkeit eingehen, in separaten Funktionen berechnet und erlauben so eine bessere Wartbarkeit des Programmcodes. Die durchgeführten Korrekturen am Verbrennungsmodell FRONT sind anhand verschiedener Experimente kurz überprüft worden und es zeigte sich weiterhin eine gute Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment; eine detaillierte Überprüfung sollte innerhalb des Validierungsvorhabens stattfinden.

4.4.2 Herausgabe einer neuen COCOSYS-Version

Im April 2013 erfolgte die Herausgabe der COCOSYS-Version V2.4. In dieser Version ist nun auch das CCI-Hauptmodul eingeschlossen.

Aufgrund notwendiger Verbesserungen und Korrekturen wurden im Rahmen des Vorhabens die laufend aktualisierten Versionen V2.4v1 bis V2.4v3 herausgegeben. In diesem Verlauf wurde nun auch die ATHLET-CD Version auf die Version V3.0A aktualisiert. Um die Konsistenz der ATHLET- und der ATHLET-CD-stand-alone-Version mit den jeweiligen gekoppelten Versionen zu gewährleisten, wird nun die sogenannte SVN-external-Funktion genutzt. Hiermit können die ATHLET-Versionen sehr einfach mit den gekoppelten Versionen synchronisiert werden. Für die Kopplung modifizierte Routinen werden in einem separaten Verzeichnis abgelegt. Somit werden die Unterschiede sofort ersichtlich.

Vor der Freigabe der neuen COCOSYS-Version sind die festgelegten Regressionstests durchgeführt worden. Einzelne Unterschiede, wie zum Beispiel Unterschiede zwischen Linux und Windowsversion, werden zurzeit noch untersucht. Hier zeigte sich, dass die Modellierung der Klappen (hier: Türen) nicht stabil ist und bei kleinsten unterschiedlichen Randbedingungen zu unterschiedlichen Ergebnissen führt.

Das COCOSYS-Benutzer-Handbuch (User Manual) ist weitgehend fertiggestellt und wird in Bezug auf eine einheitliche Nummerierung der Gleichungen überarbeitet. Sofern bezüglich der Entwicklung Änderungen im Benutzer-Handbuch notwendig sind (z. B. bzgl. der Segmentierung der Wände), wurden entsprechende Berichtsteile modifiziert bzw. erstellt. Die Umstellung des COCOSYS-Referenz-Handbuchs auf MS-Word ist dagegen noch nicht abgeschlossen. Die Handbücher werden im Folgevorhaben laufend aktualisiert.

5 Zusammenfassung

In diesem Vorhaben ist die langjährige, vom BMWi unterstützte Entwicklung der beiden GRS-Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC (gemeinsame Entwicklung mit IRSN) für Phänomene und Vorgänge im Sicherheitsbehälter von Reaktoranlagen fortgesetzt worden. Übergeordnete Zielsetzung dieses Projektes zur Code-Entwicklung ist es, den Stand der Modelle in COCOSYS und ASTEC dem Fortschritt von internationaler F&E gemäß zu aktualisieren.

Entsprechend der auf Seite 3 erläuterten Struktur des Arbeitsprogramms werden nachfolgend die erreichten Ziele für die drei technisch-wissenschaftlichen Arbeitspakete ‚COCOSYS', ‚ASTEC' und ‚Querschnittsaufgaben' separat zusammengefasst.

5.1 COCOSYS

COCOSYS hat für deutsche und osteuropäische Anlagentypen vorrangig der Generation II (z. B. DWR KONVOI, SWR-69 SWR-72, WWER 440) aber auch Generation III (z. B. WWER 1000) mittlerweile einen guten Anwendungsstand erreicht. Es fehlen jedoch Modelle für wichtige innovative Design-Merkmale von Anlagen der Generation III+ (z. B. EPR, AP1000, CAP-1400 etc.). In RS1508 wurden erste Arbeiten für die Erweiterung der Anwendbarkeit von COCOSYS auf solche LWR der Generation III+ durchgeführt. Die Möglichkeiten zur Anwendbarkeit von COCOSYS wurden bezüglich der Flutung von Raumbereichen in Reaktoranlagen erweitert. Dazu wurden generische Modelle zur Berechnung der kompletten Flutung von miteinander verbundenen Raumbereichen im SB zur Verfügung gestellt.

Das **Fluten von Raumbereichen** ist in Reaktoranlagen – abhängig vom Design und vom Unfallverlauf – entweder konstruktionsbedingt oder bedingt durch Maßnahmen zur Beherrschung des Unfalls wie z. B. beim AP1000 möglich. Entsprechende Modifikationen des Zonenmodells sind in RS1508 konzeptionell erarbeitet und zum Teil bereits umgesetzt worden. Das Nichtgleichgewichts-Zonenmodell in COCOSYS ist für das komplette Fluten der Zone erweitert worden, wobei ein neuer Typ von Strömungsverbindung zwischen zwei Raumbereichen (als Kombination aus Gas- und Flüssigkeitstransport) angelegt wurde, der einen Transport abhängig von den Geometriedaten und den aktuell wirkenden Kräften in der Zone zulässt. Die Arbeiten müssen allerdings noch fortgeführt werden. Für die Modellierung einer realen Anlage ist z. B. die Erweite-

rung dieser Funktionalität für alle vorhandenen Verbindungstypen notwendig. Auch muss der Transport von Spaltprodukten zwischen den Zonen simuliert werden. Mit Blick auf den Unfallhergang in Fukushima erlaubt der erreichte Entwicklungsstand z. B. eine flexiblere Anpassung des Datensatzes (im Hinblick auf die Unterteilung des Torus in Einzelvolumina), um die Vorgänge realitätsnäher zu beschreiben.

Eine weiterer Schwerpunkt der Arbeit wandte sich einem Thema zu, das lange Zeit nicht zufriedenstellend behandelt wurde: Der Einfluss einer möglichen thermischen Stratifikation in einem Wasserpool auf die Thermohydraulik des zugehörigen Containment-Raumes. Die Ankopplung des in Zusammenarbeit mit dem Fraunhofer Institut ITWM in der Entwicklung befindlichen detaillierten **Pool-Modells CoPool /**FRE 12**/** für die detaillierte Berechnung der Konvektion und Temperaturverteilung in einer Wasservorlage an COCOSYS ist in RS1508 realisiert worden und weit fortgeschritten. Dabei werden die Daten zur Berechnung der Zustände in Wasserpools (z. B. dem Sumpf eines DWR) in den entsprechenden Nichtgleichgewichtszonen in COCOSYS durch gemittelte Werte aus CoPool ersetzt. Im Gegenzug werden die Massen- und Energieströme der zu- und abführenden Verbindungen sowie die atmosphärischen Randbedingungen (Druck und Temperatur) von COCOSYS an CoPool übergeben. Oberflächen und Wandstrukturen werden in CoPool detailliert simuliert und es werden Mittelwerte (z. B. für die Oberflächentemperaturen) von CoPool an COCOSYS zurückgegeben. Diese können dann z. B. für die Berechnung der chemischen Reaktionen an der Oberfläche verwendet werden. Die Kopplung wird zurzeit anhand eines Datensatzes für eine deutsche SWR-72-Anlage überprüft.

Mit Blick auf den Unfallablauf in Fukushima ist ein weiterer Punkt von verstärktem Interesse: Die **Wirksamkeit von Filtersystemen** bei der kontrollierten Druckentlastung des Containments. In deutschen Kernkraftwerken werden unter anderem sogenannte Trockenfilter-Einrichtungen zur Reinigung des Abluftstroms (Rückhaltung von radioaktiven Aerosolen des Gasmassenstroms bestehend aus N_2, O_2, H_2, CO, CO_2) während einer kontrollierten Druckentlastung des Containments („Venting“) im Verlaufe von Ereignissen mit Kernzerstörung (Unfälle) eingesetzt. Für COCOSYS wurde in diesem Vorhaben ein Modell für Metallfaser-Ventingfilter /WEB 13/ erstellt und an zwei Experimenten aus der amerikanischen ACE-A-Serie zur Wirkungsweise von entsprechenden Filtertypen erfolgreich erprobt. Existierende Modelle für Filter werden zurzeit im internationalen Rahmen von CESAM bewertet. Mit dem neuen Filtermodell in COCOSYS wird dazu beigetragen.

Der Modellstand in COCOSYS wurde für weitere wichtige quelltermrelevante Vorgänge verbessert:

In einem Luft/Dampf-Gemisch entstehen in Gegenwart radioaktiver Strahlung **Radiolyseprodukte der Luft** wie z. B. O_3 (Ozon). Diese oxidieren gasförmiges elementares Iod (I_2) zu Iodoxiden (IO_x). IO_x ist ein Aerosol mit sehr feinen Partikeln (einige 0,1 µm Durchmesser). Diese zeigen im Sicherheitsbehälter ein anderes Verhalten als I_2, tragen aber auch zum Iodquellterm aus der Anlage bei. In AIM-3 wird zur Berechnung der Iodoxid-Bildung in einem Teilmodell die Ozon (O_3)-Konzentration bestimmt. Für Dampfkonzentrationen > 1 kg/m³ wurde bislang die radiolytische und die thermische O_3-Zersetzung stark überschätzt. Diese Modellschwäche wurde durch einen geänderten funktionalen Zusammenhang zwischen der Dampfkonzentration und der O_3-Zersetzung korrigiert, wobei jetzt auch die Sauerstoffkonzentration als neuer Parameter in das O_3-Modell aufgenommen wurde. Nun wird ein Sauerstoffmangel, wie er z. B. in einem Reaktorcontainment bei Rekombinatorbetrieb auftreten kann, berücksichtigt. Das Modell wurde anhand des Versuchs PHEBUS-FPT1 überprüft.

Auf der Basis experimenteller Daten aus OECD-BIP wurde der **Einfluss der relativen Feuchte** (rF) **auf die Ablagerung von Iod auf Farboberflächen** durch eine erweiterte Modellierung im Iod/Farbe-Modell berücksichtigt.

Die drei Teil-Modelle zu **Abwaschvorgängen** für unlösliche (AULA) und lösliche Aerosole sowie für Iod (Filmmodell) wurden aktualisiert und stehen für eine Zusammenführung im neu strukturierten Hauptmodul AFP zur Verfügung. Diese Zusammenführung der drei Teilmodelle, die erstmals eine geschlossene Beschreibung der komplexen Vorgänge in COCOSYS-AIM ermöglichen wird, wird im nachfolgenden Vorhaben durchgeführt.

Auf der Basis der Aer-Versuche im Rahmen des OECD-STEM-Projektes wurde ein Modell zur **radiolytischen Zersetzung von CsI** entwickelt, bei der flüchtiges I_2 freigesetzt wird, und es wurden erste Rechnungen damit durchgeführt. In dem Modell sind alle als relevant erkannten Reaktionen berücksichtigt. Noch nicht berücksichtigt sind die Prozesse, die aller Voraussicht nach für den verzögerten Beginn der I_2-Freisetzung verantwortlich sind: Die Dampfdiffusion zum CsI-Salz und der I_2-Transport durch die CsI-Schicht an die Oberfläche.

Das zentrale Thema der **Umstrukturierung des Spaltprodukt- und Aerosol-Moduls AFP** zur Aufstellung konsistenter Stoffmengenbilanzen stellte sich als komplexer her-

aus als erwartet. Obwohl wichtige Zwischenschritte (d. h. die Umsetzung des in RS1185 erarbeiteten Konzeptes innerhalb von Detail-Modellen wie z. B. Volumenkondensation, Aerosol-Ablagerung, Transportvorgänge durch Abwaschen und Drainage) in RS1508 erreicht wurden, sind noch einige Restarbeiten offen geblieben (z. B. zur Iodchemie, zum Nuklidverhalten und zum Pool-Scrubbing) und müssen im Nachfolgevorhaben abgeschlossen werden.

Die Vorgehensweise zur **Kopplung zwischen COCOSYS und ATHLET-CD bei Versagen des RDB** wurde zwischen den beiden GRS-Entwicklerteams abgestimmt und es wurden erste Schritte zur technischen Umsetzung auf beiden Seiten eingeleitet. Die technischen Arbeiten zur Datenübergabe zwischen COCOSYS und ATHLET-CD werden unmittelbar im Nachfolgevorhaben weitergeführt und abgeschlossen werden.

5.2 ASTEC

Die Arbeiten der GRS bei der ASTEC-Weiterentwicklung konzentrierten sich im Vorhaben RS1508 auf Phänomene im Sicherheitseinschluss sowie auf Erweiterungen für Siedewasserreaktoren. Der Fokus lag hierbei auf den ASTEC-Modulen CPA (Containment-Thermohydraulik) und MEDICIS (Schmelze-Beton-Wechselwirkung) bzw. der Kopplung zwischen Kühlkreislauf- (CESAR) und Containment-Thermohydraulik (CPA).

Das in RS1508 bereitgestellte **DCH-Modell** in CPA ist um die Berechnung chemischer Reaktionen der luftgetragenen Schmelze sowie von Wärmeübergängen zwischen Schmelze und Gas erweitert worden. Die neu implementierten Modelle sind in modularer Version aufgebaut und anhand einfacher Testbeispiele auf ihre Korrektheit überprüft worden. Nachrechnungen zu den heißen DISCO-Versuchen zeigen gute Übereinstimmungen zwischen ASTEC und dem Experiment. Ferner ist das in COCOSYS verfügbare detaillierte **Modell für plattenförmige Rekombinatoren** (z. B. das „AREVA“ oder „AECL“-Design) nach ASTEC/CPA übertragen worden. Außerdem sind die Korrelationen in ASTEC auf den Stand von COCOSYS gebracht worden und es ist ein Nutzerhandbuch erstellt worden. Erste Schritte für die noch ausstehende Erweiterung auf NIS-Rekombinatoren sind im CESAM-Projekt (7. Forschungsrahmenprogramm) begonnen worden.

Für die Simulation der **Schmelze-Beton-Wechselwirkung in der gefluteten Situation** wurde das vereinfachte Modell zur Berücksichtigung der Flutung der Schmelze, das

in COCOSYS zusammen mit der Modelloption für den effizienten Wärmeübergang zwischen Schmelze und Beton verwendet werden kann, nach ASTEC/MEDICIS übertragen und erfolgreich getestet.

Im Rahmen der Beteiligung an dem EU-Projekt JASMIN, das eine **Erweiterung von ASTEC für die Anwendung auf natriumgekühlte schnelle Reaktoren** als Zielsetzung verfolgt, wurde an der Erstellung eines Berichtes (Deliverable D2.3) zu Spezifikationen von benötigten Containment- bzw. Quellterm-relevanten Modellen in ASTEC mitgewirkt. Dazu wurden zunächst die früheren Arbeiten der GRS (80er bis Anfang der 90er Jahre) zum schnellen Brüter SNR-300 ausgewertet. Weiterhin wurden die im Containment-Rechenprogramm CONTAIN verfügbaren Modelle zum Natriumverhalten im Hinblick auf ihre Eignung für ASTEC für verschiedene Testfälle (u. a. FAUNA-Versuche zu Natriumbränden und ABCOVE-Experimente zum Verhalten von Natriumaerosolen) erprobt.

Unerlässlich für Deutschland und eine europaweite Akzeptanz ist die Fähigkeit, neben DWR auch SWR abbilden zu können. Für die Ertüchtigung ist den spezifischen **Eigenheiten von SWR** Rechnung zu tragen. So unterscheiden sich die Brennelemente wesentlich von solchen eines DWR durch die Umschließung mit einem kastenförmigen Blechmantel, der für jedes Brennelement einen abgeschlossenen Strömungskanal bildet. Insbesondere für die späte Phase eines schweren Unfalls, der durch massive Kernzerstörungsprozesse charakterisiert ist, bestehen derzeit erhebliche Modellschwächen in ASTEC speziell für SWR. Die im Vorgängervorhaben durchgeführten Arbeiten bei der GRS konzentrierten sich daher im Wesentlichen auf die Untersuchung der Anwendbarkeit von ASTEC auf die frühe Phase eines Störfalls in SWR bis zum Beginn der Kernaufheizung. Mit den ASTEC-Modulen CESAR für den Kühlkreislauf und CPA für den Sicherheitsbehälter wurden erste Testrechnungen am Beispiel eines SWR der Baulinie 69 durchgeführt. Dabei zeigte sich die prinzipielle Anwendbarkeit beider Module auch in gekoppelter Fahrweise. Weiterhin wurden Modellunterschiede in COCOSYS und CPA untersucht, die für einen SWR-72-Rechenfall Unterschiede bei der Temperaturentwicklung in der Kondensationskammer zwischen COCOSYS und ASTEC-CPA hervorgerufen hatten. Seitens IRSN sind in den letzten Jahren mit hohem Aufwand die Module CESAR und ICARE überarbeitet worden. Dazu zählt insbesondere auch die Möglichkeit, die typischen Kerneinbauten von SWR zu simulieren. Mit der für Ende 2014 angestrebten Freigabe der neuen Kopplung von ICARE und CESAR, bei dem CESAR über die gesamte Rechnung die Thermohydraulik in der Kernregion

rechnet, sollen alle Probleme beseitigt werden und insbesondere auch die Simulation von SWR-typischen Kernstrukturen ermöglicht werden.

Die durchgeführten Arbeiten bei der GRS konzentrierten sich im Wesentlichen auf die Untersuchung der Anwendbarkeit von ASTEC auf die frühe Phase eines Störfalls in SWR bis zum Beginn der Kernaufheizung und insbesondere auf Containment-relevante Fragestellungen, wie die Freisetzung von Wasser und Dampf in eine Kondensationskammer. Mit den ASTEC-Modulen CESAR für den Kühlkreislauf und CPA für den Sicherheitsbehälter wurden erste Testrechnungen am Beispiel eines SWR der Baulinie 69 durchgeführt. Dabei zeigte sich die prinzipielle Anwendbarkeit beider Module auch in gekoppelter Fahrweise. Weiterhin wurden Modellunterschiede in COCOSYS und CPA untersucht, die für einen SWR-72-Rechenfall Unterschiede bei der Temperaturentwicklung in der Kondensationskammer zwischen COCOSYS und ASTEC/CPA hervorgerufen hatten.

Nachdem sich die Ausrichtung von ASTEC in den letzten Jahren deutlich von einem schnell laufenden Integralcode hin zu einem detaillierten Integralcode verlagert hat – und damit näher zum Aufgabenbereich der detailliert-mechanistischen GRS-Rechencodes COCOSYS und ATHLET-CD – sowie verstärkt französische Modelle in ASTEC zur Anwendung kommen, zeichnet es sich ab, dass in der Kooperation zwischen IRSN und GRS zur ASTEC-Entwicklung mittelfristig eine neue Positionierung der Rolle und der Beiträge der GRS erforderlich wird.

5.3 Querschnittsaufgaben

Dieses Arbeitspaket beinhaltet Arbeiten, die bei Vorhabensbeginn nicht eindeutig einem der beiden Rechencodes zuzuordnen waren. Beispiele sind die Themen ‚Spaltproduktrückhaltung in Wasservorlagen‘ oder die internationale Kooperation in Netzwerken, Gruppen etc. Die Mitarbeit in CESAM mit dezidierten Arbeiten zu ASTEC wurde erst nach Start des Projektes unter den Punkt ‚Internationale Kooperation‘ aufgenommen.

Aus den in RS1508 durchgeführten Untersuchungen zur Rückhaltung von Spaltprodukten in Wasservorlagen (**Pool-Scrubbing)** und zum Modell **SPARC** wurde geschlossen, dass in SPARC viele Einzelphänomene mit einem hohen Detailgrad analytisch beschrieben werden, für die aber einzeln keine Validierung durchgeführt werden kann.

Sobald neue, belastbare experimentelle Daten für dieses Phänomen vorliegen, soll – speziell auch im Rahmen von CESAM – geprüft werden, ob korrelative Beschreibungen des Pool-Scrubbing-Vorgangs einer detaillierten Modellierung in SPARC vorzuziehen sind. Der internationale Stand von Wissenschaft und Technik sollte dementsprechend weiter beobachtet werden.

Neben der im vorhergehenden Abschnitt zusammengefassten Kooperation mit IRSN zur ASTEC-Entwicklung, speziell auch im Rahmen von JASMIN, wurde in RS1508 im größeren Umfang an den internationalen Vorhaben SARNET2 und CESAM auf europäischer Ebene sowie den Projekten BIP und STEM im Rahmen der OECD mitgewirkt.

Im Rahmen der **Teilnahme an SARNET2** war die GRS innerhalb des vorliegenden Projektes am SARNET-Arbeitspaket 4 beteiligt:

- WP4: ASTEC (ASTEC)
- WP4.1: Users' Support and Integration (USI)
- WP4.2: ASTEC Code ASsesment (ACAS)

Die Beiträge der GRS zu SARNET2 umfassten u. a. die Teilnahme an User-Workshops zu ASTEC, Beiträge zu Konferenzen (ERMSAR 2013) sowie zu Veröffentlichungen in Zeitschriften (Annals of Nuclear Energy, Nuclear Engineering and Design), Beiträge zur Erstellung aktualisierter Dokumente im Rahmen der Freigabe neuer ASTEC-Versionen, Beiträge zur Abschlussdokumentation der Arbeiten zu SARNET WP4, insbesondere Anwendungsrechnungen zu KONVOI, Unterstützung von externen Code-Anwendern bei der Lösung von Problemen, Einführungsveranstaltungen zu ASTEC. Arbeitsergebnisse der Validierung und Qualifizierung von ASTEC durch die Anwendung auf DWR-Anlagen deutscher Bauart (KONVOI) und der Validierung des ASTEC-Moduls CPA durch Nachrechnung eines Sprühexperimentes in der französischen MISTRA-Anlage sind im SARNET-Rahmen in verschiedenen Progress- und Assessment-Reports dokumentiert worden.

Für die Erhebung des Standes von internationaler F&E wurde mit größeren Beiträgen (bzw. in der Funktion der verantwortlichen Autorenschaft für Einzelkapitel) an der Erstellung zweier sogenannter **State-of-the-Art-Berichte auf Initiative des CSNI** mitgewirkt: Einer zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI, inkl. Betrachtung der möglichen Kühlbarkeit mit Wasser) und ein Bericht zur Wirksamkeit von gefilterten

Druckentlastungssystemen des Containments. Die Fertigstellung des Berichtes zu MCCI ist für das erste Halbjahr 2015 vorgesehen, der andere Bericht wurde Mitte 2014 durch das CSNI bestätigt.

Im Rahmen von **CESAM** beteiligte sich die GRS intensiv bei der Erhebung des internationalen Standes von F&E zu den Themen *gefilterte Druckentlastung*, *Pool Scrubbing*, *Wirkung von NIS-Rekombinatoren* und *MCCI*, jeweils mit Blick auf Modellansätze, die für ASTEC geeignet sind. Hieraus konnten entsprechende Empfehlungen für weitere an ASTEC-angelehnte Arbeiten im Rahmen von CESAM abgeleitet werden, z. B. die Übernahme der automatischen Filterkalibrierung aus COCOSYS nach ASTEC/CPA, die Fortsetzung der Bewertung des Standes von F&E zum Pool Scrubbing im Rahmen eines internationalen Konsortiums, die Fortsetzung der Analysen zu NIS-Rekombinatoren auf der Basis des detaillierten Modells für plattenförmige Rekombinatoren in CPA im Vergleich zu korrelativen Ansätzen, die intensivierte Validierung von MEDICIS auf der Basis der MOCKA-Versuche. Die langjährige **Kooperation zwischen GRS und IRSN** zur Entwicklung von ASTEC wurde im Rahmen von CESAM damit fortgesetzt. Wie erwähnt zeichnet es sich ab, dass mittelfristig eine neue Positionierung der Rolle und der Beiträge der GRS erforderlich ist.

Einen großen Arbeitspunkt stellt die **Auswertung von Rückflüssen** aus der internen und externen Anwendung zu COCOSYS und ASTEC dar. Eine Ausweitung sowohl der Akzeptanz als auch der Anwendung durch andere Partner ist nur durch entsprechende ad-hoc Unterstützungsarbeiten zu erreichen, um die Qualität der erzielten Ergebnisse bei den Partnern sicherzustellen. Die **Qualitätssicherung** im eigenen Haus erfolgt zwar mit großer Sorgfalt, aber sie kann sich natürlich nicht mit großen Herstellern von kommerzieller IT-Software messen, d. h. die GRS ist bei der QS stärker auf Rückflüsse durch den Anwender angewiesen. Die hier durchgeführten Arbeitspunkte Rückflüsse / Nutzerunterstützung beinhalteten eine Vielzahl von Fragestellungen, die beispielhaft in den Abschnitten 4.2 und 4.4 erläutert wurden.

5.4 Fazit

Mit den in diesem Vorhaben durchgeführten Arbeiten wurde ein wesentlicher Beitrag geleistet, die Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC auf dem aktuellen Stand internationaler F&E zu halten.

In COCOSYS war eine wesentliche Zielsetzung, die Qualität der Thermohydraulik-Simulationen durch eine verbesserte Behandlung von Wasserpools im Containment (Auffüllen von atmosphärischen Zonen mit Wasser, detaillierte Simulation eines Wasserpools mit CoPool) zu verbessern. Für beide Punkte stehen jetzt entsprechende Modellerweiterungen oder erste Lösungsansätze zum Einsatz in COCOSYS bereit, die an vereinfachten Testbeispielen bereits erfolgreich getestet sind. Erfahrungsgemäß werden für die Anwendung dieser Modelle auf komplexe Reaktorfälle weitere Anpassungsarbeiten nötig, die im Nachfolgevorhaben geplant sind.

In Bezug auf die Verbesserung von direkt quelltermrelevanten Modellen wurde die Umstrukturierung des AFP-Moduls mit der Zielsetzung der konsistenten Bilanzierung von Spaltprodukten und Aerosolen weiter vorangetrieben. Die Umstrukturierung stellte sich aber als komplexer heraus, als erwartet. Um dieses neue, umstrukturierte Modul zukünftig nutzen zu können, fehlen noch Restarbeiten, die im Nachfolgevorhaben geplant sind. Aus diesem Grund muss die Implementierung von bereits erarbeiteten Modellverbesserungen mit Bezug zu Spaltprodukt/Aerosolbilanzen, z. B. zum Abwaschen, zurückgestellt werden.

Mit dem in diesem Vorhaben entwickelten Filtermodell für Metallfaser-Ventingfilter konnte eine wichtige Grundlage geschaffen werden, auf welcher zurzeit Diskussionen mit internationalen Experten im CESAM-Projekt zur weiteren Verbesserung von Modellen für die Wirksamkeit gefilterter Druckentlastungen geführt werden.

Was die Modelle im CCI-Modul angeht, findet international nach Ende des OECD-CCI-Projektes eine Konsolidierungsphase statt, auf der Bilanz gezogen wird, was man in der zurückliegenden, internationalen Forschung zu diesem Thema erreicht hatte. Demensprechend wurden bzw. werden State-of-the-Art-Berichte für SARNET und CSNI angefertigt. Die internationale Einschätzung zu MCCI sieht momentan empirische Ansätze zur Beschreibung des Aufschmelzens von Beton vor; die verfügbaren Daten lassen keine dezidiert mechanistischen Modellverbesserungen in diesem Punkt erwarten, da die Vorgänge als zu komplex angesehen werden. Die bei KIT in Karlsruhe laufenden MOCKA-Versuche sind durch Schmelzen mit Metallen und Oxiden, prototypischer Leistungsfreisetzung in der Schmelze und Armierung im Beton charakterisiert. Die experimentelle Datenlage zeigt zum einen eine Reproduzierbarkeit von Einzelexperimenten, aber bei Variation der Hauptparameter wie Betonsorte (silikatisch/LCS) und Armierung (ohne/mit) eine komplexe noch nicht verstandene Datenlage. Auch hier konnte

vorerst keine mechanistisch angelegte Modellverbesserung in Betracht gezogen werden.

Für die Schließung der Modellkette bei RDB-Versagen (Kopplung zwischen ATHLET-CD und COCOSYS für den Austrag von Schmelze) wurden Vorarbeiten eingeleitet. Dieser Punkt ist ein wesentliches Ziel im Anschlussvorhaben.

Die Arbeiten für die ASTEC-Weiterentwicklung wurden wie geplant fortgesetzt. Es konnte die Expertise der GRS in Einzelpunkten (Einbau eines DCH-Modells in ASTEC mit Nachrechnung eines Experimentes hierzu, Identifikation von Entwicklungsbedarf für natriumgekühlte, schnelle Brutreaktoren im Projekt JASMIN, Bewertung des Entwicklungsstandes in ASTEC zu MCCI, Filtersystemen, Rekombinatoren, Pool Scrubbing im Projekt CESAM) erfolgreich eingebracht werden. Die Erfahrungen zeigen aber, dass stärkere Fortschritte bei der ASTEC-Codeentwicklung durch die GRS wegen der parallelen Bearbeitung zweier Entwicklungsstränge (COCOSYS und ASTEC) zukünftig nur mit verstärkten Ressourcen möglich sind, u. a. deswegen, weil sich die Modellbasis immer weiter voneinander entfernt. Im Anschlussprojekt wird die GRS prioritär an der Weiterentwicklung von COCOSYS (speziell auch in der Anbindung an ATHLET-CD) als Basis ihrer Modellentwicklung festhalten.

Aus den Arbeiten zum Pool-Scrubbing wurde geschlossen, neue Modellierungsansätze erst auf der Basis von neuen verbesserten Experimenten zu erarbeiten. Sowohl die geplanten Experimente der RWTH Aachen als auch die Gründung einer internationalen Kooperation zum Pool-Scrubbing oder möglicherweise Daten aus PASSAM lassen den Zugriff auf neue Experimentaldaten durch die GRS in naher Zukunft erwarten.

Für die Zufriedenheit von externen Partnern bei der COCOSYS-Nutzung und nicht zuletzt auch als bedeutsames Mittel der Qualitätssicherung wurden in diesem Vorhaben entsprechende Arbeiten zur Nutzerunterstützung / Auswertung von Rückflüssen aus der Anwendung durchgeführt. COCOSYS wird außer von der GRS auch von den folgenden deutschen Einrichtungen:

– AREVA Erlangen, AREVA Offenbach, Becker Technologies Eschborn, FZ Jülich, FZ Rossendorf, Hochschule Zittau, ITWM Fraunhofer Kaiserslautern, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Ruhr-Uni-Bochum, RWTH Aachen, TÜV Nord, TÜV Nord SysTech, TÜV Süd, Vattenfall Europe

und den folgenden internationalen Instituten (in alphabetischer Reihenfolge nach Ländern geordnet):

– ANRA, NRSC (Armenien), ENPRO (Bulgarien), SNPRI/CNPRI (China), FORTUM (Finnland), DCNS (Frankreich), Uni Pisa (Italien), LEI (Litauen), EREC, IBRAE, NIKIET, Rostechnadzor, SEC NRS (alle Russland), NRA (Slowakei), NRI Rez (Tschechien), Energorisk, SSTC (beide Ukraine), NUBIKI (Ungarn), JIPNR Sosny (Weißrussland)

in unterschiedlichem Umfang genutzt. Für die Sicherstellung der internationalen Akzeptanz und der Kontinuität oder gar Ausweitung der Nutzung bei externen Partnern ist es zukünftig nötig, den Code COCOSYS in den Punkten Programmcode, Dokumentation, Anwenderfreundlichkeit zu konsolidieren. Dies ist eine wichtige Zielsetzung im Anschlussvorhaben.

Literatur

/ARN 08/ Arndt, S., Nowack, H.: Status des Regressionstestens für COCOSYS V2.4 (dev), Vorhaben RS 1159: Weiterentwicklung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC, GRS-A-3437, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, September 2008

/BAN 12/ Band, S., Schwarz, S., Sonnenkalb, M.: Nachweis der Wirksamkeit von H2-Rekombinatoren auf der Basis ergänzender analytischer Untersuchungen mit COCOSYS für die Referenzanlage GKN-2, Vorhabensbericht zu 3609R01375, GRS-A-3652, März 2012

/BEA 92/ Beahm, E.C. et al.: Iodine Chemical Forms in LWR Severe Accidents, NUREG/CR-5732, Oak Ridge National Laboratory (Apr. 1992)

/BOE 82/ Bönigke, G., Bogorinski, P., Martens, K.-H.: Chemische und thermische Wechselwirkungen bei Hypothetischen Kernschmelzunfällen in schnellen natriumgekühlten Reaktoren, GRS-A-734, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 1982

/BOE 86/ Bönigke, G.: FRIDA – Ein Rechenprogramm zur Beschreibung des instationären Feuchte- und Wasserdampftransports im Beton bei hoher einseitiger Temperaturbelastung, GRS-A-1270, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 1986

/BOE 06/ Böhm, J.: Modellierung der Prozesse in katalytischen Rekombinatoren, Schriften des Forschungszentrum Jülich, Band 61, 2006

/BOS 06/ Bosland, L., Girault, N. and Funke, F.: Final analyses of PARIS experimental results relative to air radiolytic products and associated modelling: speciation, kinetics of formation and adsorption on surfaces, NT IRSN/DPAM/SEMIC 2006-237 (2006)

/BOS 08/ Bosland, L., Funke, F., Girault, N., Langrock, G.: PARIS project: Radiolytic oxidation of molecular iodine in containment during a nuclear reactor severe accident; Part 1. Formation and destruction of air radiolysis products - Experimental results and modelling, Nucl. Eng. and Des. 238 (2008) 3542-3550

/BOS 12/ Bosland, L., Weber, G., Klein-Hessling, W., Girault, N., Clement, B.: Modelling and interpretation of iodine behaviour in Phebus FPT-1 Containment with ASTEC and COCOSYS, Nucl. Techn. 177, pp 36-72 (Jan. 2012)

/CHA 13/ Chatelard, P. et al.: Final synthesis report on ASTEC, SARNET2-ASTEC-D4.5, July 2013

/CHA 13b/ Chatelard, P., Reinke, N., Ezzidi, A., Lombard, V., Barnak, M., Lajtha, G., Slaby, J., Constantin, M., Majumdar, P.: Synthesis of the SARNET FP7 WP4 activities on SARNET topic – Focus on ASTEC V2 applications at full scale conditions, 6th European review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR-2013), Avignon, October 2013 (http://www.sar-net.eu/node/125)

/CHA 13c/ Chatelard, P. et al.: Evolution of the integral code ASTEC V2.0-rev3 with respect to the original V2.0 version, ASTEC-V2/DOC/13-03, Saint-Paul-les-Durance, 2013

/CHA 13d/ Chatelard, P., Reinke, N.: Overview of the integral code ASTEC V2.0, ASTEC-V2/DOC/13-03, Saint-Paul-les-Durance, 2013

/CHA 13e/ Chatelard, P. et al.: Third periodic progress report on ASTEC topic, SARNET2-ASTEC-P12, Mai 2013

/CHA 14/ Chatelard, P., Reinke, N., Ezzidi, A., Lombard, V., Barnak, M., Lajtha, G., Slaby, J., Constantin, M., Majumdar, P.: *Synthesis of the ASTEC integral code activities in SARNET – Focus on ASTEC V2 plant applications*, Annals of Nuclear Energy, Volume 74, December 2014, Pages 224-242, ISSN 0306-4549.

/CHA 14b/ Chatelard, P., Reinke, N., Arndt, S., Belon, S., Cantrel, L., Carenini, L., Chevalier-Jabet, K., Cousin, F., Eckel, J., Jacq, F., Marchetto, C., Mun, C., Piar, L.: *ASTEC V2 severe accident integral code main features, current V2.0 modelling status, perspectives*, Nuclear Engineering and Design, Volume 272, June 2014, Pages 119-135, ISSN 0029-5493.

/CHE 83/ Cherdron, W., Jordan, S.: Die Natrium-Brandversuche in der FAUNA-Anlage auf Brandflächen bis 12 m^2, KfK 3041, Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1983

/CHE 90/ Cherdron, W., Jordan, S., Lindner, W.: Die Natriumbrand-Untersuchungen in der FAUNA-Anlage, Teil 1: Poolbrände und Aerosolverhalten, KfK 4358, Kernforschungszentrum Karlsruhe 1990

/CRA 14/ Cranga, M. et al.: Towards an European consensus on possible causes of MCCI ablation anisotropy in an oxidic pool, Annals of Nuclear Energy 74 (2014), p. 72–88, 2014

/DIC 90/ Dickinson, D.R., McCormack, J.D., Allemann, R.T.: Experimental Results of ACE Vent Filtration: KfK Metal Fiber Filter Tests, Westinghouse Hanford Company and Battelle Pacific Northwest Laboratories, ACE-TR-A14 (April 1990)

/DOR 07/ Van Dorsselaere, J. P., et al.: ASTEC Quality Assurance – IRSN-GRS Common Frame of Reference, ASTEC-V1/QA/07-02, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire, März 2007

/DRI 06/ Drinovac, P.: Experimentelle Untersuchungen zu katalytischen Wasserstoffrekombinatoren für Leichtwasserreaktoren, Dissertation RWTH Aachen, 2006

/ECK 11/ Eckel, J., Weber, G.: Einbau des pH-Modells von AREVA in COCOSYS/AIM“, GRS-V-RS 1185-2/2011 (Nov. 2011)

/ECK 14/ Eckel, J.: Development and Validation of a new DCH Model in ASTEC V2.1, Technische Notiz, GRS-V-RS1508-2/2014, ASTECV2/DOC/14-02, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2014

/FOI 13/ Foit, J. J., Cron, T. and Fluhrer, B.: Interaction of a Metal and Oxide Melt with Reinforced Concrete in MOCKA Experiments, The 15th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal - Hydraulics, NURETH-15, Paper 539, Pisa, Italy, May 12-17, 2013

/FOI 14/ Foit, J. J.: MOCKA versus CCI: Pronounced Lateral Ablation of LCS Concrete in MOCKA Experiments. Remarks on MCC_RI, NUGENIA TA2 Meeting, Santa Cruz de Tenerife, Spain, 2013

/FIS 98/ Fischer, K.: Modellierung von Abscheidungsvorgängen in Wasservorlagen, Battelle Ingenieurtechnik GmbH Eschborn, BF-R68.411-1, Eschborn, 1998

/FIN 95/ Fink J.K., Thompson D.H., Spencer B.W., Sehgal B.R.: Aerosol and Melt Chemistry in the ACE Molten Core-Concrete Interaction Experiments", High Temperature and Materials Science 33(1), pp. 51-76, 1995.

/FRE 12/ Freitag, M., Fischer, K.: Unterstützende Arbeiten zur Entwicklung eines mehrdimensionalen Poolmodells, Test- und Validierungsrechnungen zur Qualifikation des numerischen Lösers CoPool anhand strömungsdynamisch und thermisch relevanter Vorgänge in Wasservorlagen, Becker Technologies Eschborn, Bericht BT-70148-1, Februar 2012

/FRI 93/ Friederichs, H.-G., Wiesemes, J.: Variationsrechnungen zu ABCOVE-Experimenten mit dem Aerosolteil von CONTAIN, GRS-A-2044, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 1993

/FRI 05/ Frising, T., Thomas, D., Bémer, D., Contal, P.: Clogging of fibrous filters by liquid aerosol particles: Experimental and phenomenological modelling study, Chemical Engineering Science, 60 (10) 2751–2762 (May 2005)

/FUN 07/ Funke, F.: Model to predict the pH of PWR sumps in severe accidents, AREVA Work report NTR-G/2006/en/0118, Erlangen, Oct. 2007 (restricted)

/GAU 05/ Gauntt, R. O. et al.: MELCOR Computer Code Manuals Vol. 2: Reference Manual, Version 18.6, NUREG-/CR-6119, Vol. 2, Rev. 3 (2005)

/GEL 90/ Gelbard, F.: Modelling Mulitcompartment Aerosol Particle Growth by Vapour Condensation, Aerosol Science and Technology 12:399-412, 1990

/GOR 13/ Gornak, T., Minev, P., et al.: On a fast algorithm and software for 3D simulation of thermal stratification in containment pools of nuclear power plants, Fraunhofer ITWM reports, 238 (2013)

/GRS 11/ Pautz, A., Velkov, K., Glaeser, H., Sonnenkalb, M., Sievers, J.: http://www.grs.de/en/content/scientific-codes-developed-and-used-grs, Scientific Codes Developed and Used at GRS, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2011

/GRS 82/ GRS: Risikoorientierte Analyse zum SNR-300, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, ISBN 3-923875-00-2, 1982

/HER 11/ Hering, W., Stieglitz, R., Gordeev, S., Tromm, W.: Overview on Safety Investigations for Gas and Liquid Metal Cooled Innovative Systems, CSARP-2011, Bethesda USA, September 20-23, 2011

/HER 13/ Herranz, L. E., Garcia, M., Morandi, S.: Benchmarking LWR Codes Capability to Model Radionuclide Deposition within SFR Containments: An Analysis of the Na ABCOVE tests, Nuclear Engineering and Design 265 (2013) 772– 784, 2013

/HER 13b/ Herranz, L. E., Garcia, M., Parisi, C., Balestra, P., Eckel, J., Spengler, C., Kissane, M. P.: Detailed specifications of models for containment and source term, JASMIN-MODELLING-D2.3, IRSN, 2013.

/HER 14/ Herranz, L. E. et al.: Synthesis of needs of ASTEC models improvements for ASTEC V2.1. Technischer Bericht D20.22. CESAM, März 2014.

/HIL 03/ Hill A., Movahed M. A.: Passive Autocatalytic Recombiner (PAR), Empirical Equation for H2 and CO Depletion Rate Calculation, NGPS5/2003/en/0040, Framatome ANP, March 2003, **nicht öffentlich**

/HIL 85/ Hilliard, R. K., McCormack, J. D., Muhlestein, L. D.: Results and Code Predictions for Abcove Aerosol Code Validation with Low Concentration NaOH and NaI Aerosol – CSTF Test AB7, Westinghouse Hanford Company, Prepared for the USDOE, HEDL-TME--85-1, 1985

/HOE 10/ Höhne, M., Weber, G.: Interpretation of the OECD THAI CsI Aerosol Wash Down Test AW by COCOSYS Analyses, OECD THAI Seminar, Paris, October 6-7, 2010

/HON 96/ Hontanon, E.: Steam Condensation onto Aerosols, The Moving-Grid-Model in CONTAIN 1.12, ITN/SN-11/II-96, Ciemat, Madrid 1996

/HUE 90/ Hüttermann, B.: Ermittlung einer universell anwendbaren Funktion für den konvektiven Wärmeübergang bei freier laminarer und turbulenter Strömung für verschieden geformte typische Sicherheitsbehälterstrukturen für den Bereich 10-4 GR < PR * GR < 1012, TN-HUE 02/90, GRS, 1990

/KAN 09/ Kanzleiter, T.: Quick Look Report: Hydrogen Recombiner Tests HR-14 to HR-16. Reactor Safety Research Project 150 1326, OECD/NEA THAI Project Report No. 150 1326–HR-QLR-4, Becker Technologies GmbH, Eschborn, Germany, October 2009

/KER 98/ Kersting, E., Löffler, H.: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu schweren Störfällen in SWR, BAND 1: Zusammenfassung, Probabilistisches Konzept, Integrale Unfallablaufanalysen, GRS-A-2519, 1998

/KLH 00/ Klein-Heßling, W., Arndt, S., Weber, G.: COCOSYS V1.2 Reference Manual, GRS, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2000.

/KLE 12/ Klein-Heßling, W. u. a.: Gezielte Validierung von COCOSYS und ASTEC sowie Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse zum Iodverhalten, Abschlussbericht GRS-A-3691, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Dezember 2012

/KOS 07/ Kósa, P.: Development and Assessment of Fission Product Release Model for MEDICIS (ASTEC), VEIKI – Institute for Electric Power Research Co., Budapest, Technical Report VEIKI 21.51-726, 2007

/LAN 86/ Langhans, J.: Entwicklung eines Siedemodells für Vergleichsrechnungen zu CONTAIN (Programm SIED), GRS-A-1239, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 1986

/LAN 86b/ Langhans, J.: Verifikation der CONTAIN-Ansätze zum Natriumsieden in einem System gekoppelter Räume, GRS-A-1301, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 1986

/LAN 90/ Langhans, J.: Verifikation und Anwendung des neuen CONTAIN-Modells zur Wasserfreisetzung aus über 100 ° C erwärmten Beton, GRS-A-1658, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 1990

/LAN 91/ Langhans, J.: Natrium-Lachenbrand-Vergleichsrechnungen mit CONTAIN zu den KFK-Versuchen FAUNA 5 und 6, GRS-A-1856, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 1991

/LAU 14/ Laufenberg von, B., Colombet, M., Freitag, M.: Wash-down of insoluble aerosols. Results of the Laboratory Tests related to THAI AW3 Test, Becker Technologies GmbH, Eschborn, 1501455–TR–AW3-LAB (July 2014)

/LEE 82/ Lee, K.W., Liu, B.Y.H.: Theoretical Study of Aerosol Filtration by Fibrous Filters, Aerosol Sci. Technol., 1:47-62 (1982)

/MAN 07/ Mangarjuna Rao, P., Sundararajan, T., Kasinathan, N. and Rajan, M.: Analysis of Enclosed Sodium Pool Fire in Sodium Fire Experimental Facility Proceedings of ICONE15, April 22 - 26, 2007, Nagoya, Japan, 2007

/MAT 14/ Mathe, E.: Numerical Simulation STARK and Experimental Study ESSTIA – Study of the physiochemical transformations of sodium aerosols, Rapport No. PSN-RES/SAG/2014-00156, IRSN Cadarache, 2014

/MON 11/ Monti, S.: IAEA Programme on Fast Reactors Technology, Technology Assessment of Small and Medium-Sized Reactors (SMRs) for Near Term Deployment, IAEA HQ, Vienna, 5 – 9 December 2011

/MOR 85/ Morlock, G.: Der Einfluss der Garvitationskoagulation auf das Aerosolverhalten in einem Containmentsystem eines schnellen Brutreaktorsund auf die Freisetzung nach außen, GRS-A-1111, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 1985

/NOW 10/ Nowack, H.: Umstellung des COCOSYS Rekombinatormodells auf eine diffusionskontrollierte Reaktionskinetik, GRS-A-3542, Mai 2010

/NOW 12/ Nowack, H., Pelzer, M.: Status des Regressionstestens für ASTEC V2.0r2, Technical Report, GRS-A-3681, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2012

/NOW 13/ Nowack, H.: ASTEC/CPA recombiner models and correlations - Model description, Rev 1, ASTECV2/DOC/13-06, March 2013

/NOW 13b/ Nowack, H. et al.: Identification of available experiments for ASTEC validation and needs of new experiments, Technischer Bericht D20.21, CESAM, Nov. 2013

/NOW 14/ Nowack, H.: ASTEC/CPA recombiner models and correlations - Model description, Rev 2, ASTECV2/DOC/14-04, July 2014

/OECD10/ OECD/NEA - THAI Project - Hydrogen and Fission Product Issues Relevant for Containment Safety Assessment under Severe Accident Conditions, Final Report, NEA/CSNI/R(2010)3, June 2010

/SCH 03/ Schmitz, B. M.: COCOSYS / SPARC-B/98: Nachrechnung der POSEIDON-Testserie PA-06 bis PA-21, Technische Notiz TN-SMZ-03-1, September 2003

/SIM 14/ Simon, B., Klauck, M., Heidelberg, D., Allelein, H.-J., Reinecke, E.-A., Thesing, E., Bendel, E., Vos, A.: Verbesserung und Validierung der Modellierung des Betriebsverhaltens katalytischer Wasserstoffrekombinatoren in Sicherheitsbehältern von Kernkraftwerken, Abschlussbericht / Final Report Reaktorsicherheitsforschung - Vorhaben-Nr. 1501394, Lehrstuhl für Reaktorsicherheit und -technik der RWTH Aachen, 2014

/SPE 12/ Spengler, C. et al.: Weiterentwicklung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC, GRS-A-3654, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2012

/SPE 14/ Spengler, C. et al.: Transposition of 2D Molten -Corium-Concrete Interactions from experiment to reactor, Annals of Nuclear Energy 74 (2014) 89–99, 2014

/REI 13/ Reinke, N., Nowack, H., Arndt, S.: ASTEC V2.0 code application at GRS, SARNET2-ASTEC-P13; May 2013

/REI 13b/ Reinke, N. und Eckel, J.: Containment Part of ASTEC (CPA module), ASTEC V2.0 training course, Aix-en-Provence, 2013

/VDI 74/ VDI –Wärmeatlas 2. Auflage 1974, Blätter FA 1 – FA 4

/WEB 09/ Weber, G., Funke, F.: Description of the Iodine Model AIM-3 in COCOSYS, GRS-A-3508, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit mbH, Köln, 2009

/WEB 11/ Weber, G.: Ein neues Abwaschmodell für unlösliche Aerosole (AULA), GRS-TN, Köln, Aug. 2011

/WEB 12/ Weber, G., Krzykacz-Hausmann, B., Funke, F.: Unsicherheits- und Sensitivitätsuntersuchung der COCOSYS-AIM-Ergebnisse zum Iodverhalten im PHEBUS-Versuch FPT1“, GRS-A-3676 (2012)

/WEB 13/ Weber, G.: Ein COCOSYS-Modell für Metallfaser-Ventingfilter und Nachrechnung der ACE-Versuche AA19 und AA20
GRS-A-3727, GRS Köln, 2013

/WIL 96/ Wilhelm, J.G.: Provisions for Containment Venting in Germany, 24th DOE/NRC Nuclear Air Cleaning and Treatment Conference, Portland, Oregon, USA, July 15 – 18, 1996

Abbildungsverzeichnis

Tabellenverzeichnis

**Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH**

Schwertnergasse 1
50667 Köln
Telefon +49 221 2068-0
Telefax +49 221 2068-888

Forschungszentrum
85748 Garching b. München
Telefon +49 89 32004-0
Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200
10719 Berlin
Telefon +49 30 88589-0
Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4
38122 Braunschweig
Telefon +49 531 8012-0
Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de

ISBN 978-3-944161-39-6